

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

E.A.P. DE FÍSICA

Interferencias Cuánticas en Corrales Cuánticos

TESIS

para optar el título profesional de Licenciado en Física

AUTOR

Richard Saúl Toribio Saavedra

ASESOR

Jaime Francisco Vento Flores

Lima – Perú

2010

a mi querida familia.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al asesor Dr. Jaime Francisco Vento Flores por el aporte a esta tesis, el apoyo y la exigencia para que este trabajo se haga realidad. Asimismo, al Prof. Dr. José d'Albuquerque e Castro por el apoyo en esta investigación.

Mi sincero agradecimiento a mis profesores: Paucar, Denegri, Victor, Zalazar, Contreras, Tantalean, Maria Luisa Aguilar, entre otros por su sabia enseñanza y dedicación a mi profesión.

Durante mis años de estudiante universitario, he tenido el honor de haber compartido buenos y gratos momentos con: Marta, Nikifor, Monroy, Mary, Filiberto, Llamoya, Walter, Dalber, Jaime, Rafael, Gisella, Mario, Carlota, Vicente, Whualkuer, etc.

El Seminario de Astronomía y Astrofísica (SAA) merece una mención especial. Finalmente, estoy eternamente agradecido a mis padres Alfonso Toribio y Eustaquia Saavedra por el apoyo incondicional durante mis años de estudiante en mi alma mater FCF-UNMSM.

Índice general

1. Introducción	1
2. Aproximación de enlace fuerte y funciones de Green	6
2.1. Aproximación de enlace fuerte	7
2.1.1. Sistemas cristalinos	9
2.2. Funciones de Green	10
3. Bases teóricas de los corrales cuánticos	13
3.1. Principio básico del Microscopio de Efecto Túnel (STM)	15
3.1.1. Teoría STM	17
3.2. Imagen cuántica de impurezas en corrales elípticos	19
4. Modelo de enlaces fuertes en los corrales cuánticos	22
4.1. Sistemas sin impurezas	23
4.2. Impurezas no magnéticas en corrales cuánticos	30
4.2.1. Sistemas con una impureza	32
4.2.2. Sistemas con dos impurezas	37
4.3. Energía de interacción entre impurezas no magnéticas	38
5. Conclusiones	44

Índice de cuadros

4.1.	<i>Tabla de los parámetros de la elipse de excentricidad $e = 0,8$, donde a es el semi-eje mayor, b es el semi-eje menor, c la distancia focal, N_s el número de átomos que conforman la elipse, a_0 es el parámetro de red y A el área de la elipse.</i>	23
4.2.	<i>Tabla de los parámetros de la elipse de excentricidad $e = 0,6$, donde a es el semi-eje mayor, b es el semi-eje menor, c la distancia focal, N_s el número de átomos que conforman la elipse, a_0 es el parámetro de red y A el área de la elipse.</i>	24

Índice de figuras

3.1.	<i>Las dos primeras figuras arriba muestran las topografías observadas con el STM y las dos figuras de abajo muestran los mapas espectrales asociados [33]. Cuando un átomo de Co se localiza en un foco del corral cuántico elíptico (izquierda superior), el efecto Kondo es evidente en ambos focos (izquierda inferior). Cuando el átomo es localizado en otro lugar de la elipse (derecha superior), no aparece la imagen cuántica (derecha inferior).</i>	14
3.2.	<i>Representación esquemática de la separación superficie-punta del STM [34].</i>	16
3.3.	<i>La figura muestra los patrones de interferencia cuántica que se forman en el interior de los corrales cuánticos de diferentes formatos obtenidos por STM. Los efectos de confinamiento del electrón son evidentes ([36]).</i>	20
4.1.	<i>La figura muestra el corral elíptico (ecuación (4.2)), donde la línea continua (color azul) representa el contorno donde el potencial es infinito.</i>	24
4.2.	<i>Las figuras muestran la densidad de estado total versus energía para el mismo corral elíptico y para la red infinita bidimensional [27], respectivamente.</i>	25

- 4.3. *Densidad de probabilidad $\rho_k(x, y)$ versus la posición (x, y) para los estados $k = 1, 12, 81$, y 92 , con autovalores: $\varepsilon_1 = -1,99568$, $\varepsilon_{12} = -1,95805$, $\varepsilon_{81} = -1,76764$ y $\varepsilon_{92} = -1,74021$, respectivamente. La figura (a) representa el estado fundamental y las figuras (b), (c) y (d) representan los estados donde la densidad de probabilidad es mayor en los focos del mismo corral elíptico sin impurezas. 27*
- 4.4. *Las dos figuras de arriba muestran la densidad de probabilidad $\rho_k(x, y)$ versus la posición (x, y) y la proyección sobre la superficie, respectivamente. Las dos figuras de abajo muestran cortes de la superficie sobre el eje mayor (x) y sobre el eje focal (y) del lado izquierdo para un corral elíptico con $a = 35$, $b = 21$ y $k = 12$, correspondiendo a la energía $\varepsilon_{12} = -1,95805$ 28*
- 4.5. *Las figuras en la columna de la izquierda muestran la superficie $\rho(x, y)$ para toda la región de la elipse, para valores de $M = 16, 82$ y 91 , mientras que las de la derecha representan la sección a lo largo del eje mayor (x) de la elipse (las líneas continuas representan la localización de los focos F_1 y F_2). Las energías por sitios, definidas en la ecuación (4.7), para cada M son: $-0,01374$, $-0,06707$ y $-0,07394$, respectivamente. 29*
- 4.6. *Construcción de una elipse con una única impureza substitucional situada: en el foco izquierdo $F1(-c, 0)$ (figura del lado izquierdo) y en la posición $(0, -Y)$ en el eje menor (figura del lado derecho) del corral. 30*
- 4.7. *Construcción de una elipse que contiene dos impurezas substitucionales colocadas primero en las posiciones $F1$ y en X a lo largo del eje mayor de la elipse (figura de la izquierda), y luego en la coordenada $(0, -Y)$ y en Y a lo largo del eje menor de la elipse (figura de la derecha). . . 31*

- 4.8. *Densidad espacial de carga en el sitio de la impureza no magnética, localizada en la posición focal $(-28, 0)$ de un corral elíptico con $a = 35 a_0$ y $b = 21 a_0$ en función de $\Delta\varepsilon$. Mostramos los resultados para $M = 16$ 33*
- 4.9. *La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y)$ versus la posición (x, y) , y un corte sobre el eje menor (y) del corral elíptico con dimensiones: $a = 35$, y $b = 21$. La impureza no magnética está localizada en el punto $(0, -14)$ de la elipse con $\Delta\varepsilon = -0,5$, para $M = 16$. 33*
- 4.10. *La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y)$ versus la posición (x, y) , y un corte sobre el eje mayor (x) del corral elíptico con $a=35$, y $b=21$. Una impureza está localizada en el foco de la elipse con un potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$. La primera fila es para $M = 16$, la segunda para $M = 82$ y la tercera para $M = 91$. En la segunda columna las flechas indican la localización del otro foco. 35*
- 4.11. *La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y)$ versus la posición (x, y) , y un corte sobre el eje x para $M = 16$. La primera fila es para el corral circular con radio $R = 35a_0$. La segunda fila es para el corral rectangular con las dimensiones de $L_1 = 70 a_0$ y $L_2 = 42 a_0$. Para ambos corrales, la impureza fue localizada en la posición $(-28, 0)$ con un potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$. En la segunda columna, en el inset las flechas indican la localización del otro punto focal $(+28, 0)$. . 36*

- 4.12. *La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(j)$ versus la posición $(x, 0)$, y un corte sobre el eje mayor del corral elíptico con las dimensiones de $a=35$, $b=21$. Hemos fijado una impureza en la posición $(-28, 0)$ y la segunda impureza situada en las posiciones $(-5, 0)$, $(0, 0)$, $(5, 0)$ y $(-28, 28)$, con el mismo potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$, correspondiente para $M = 16$. Las flechas indican la localización del otro punto $(+28, 0)$ 38*
- 4.13. *Las figuras muestran la energía de interacción $I(x; M)$ entre las dos impurezas en función de sus posiciones (x) dentro de la elipse para $M = 16$ (a), $M = 82$ (b) y $M = 91$ (c). 41*
- 4.14. *Energía de interacción $I(x, M)$ entre dos impurezas atractivas ($\Delta\varepsilon = -0,5$), versus las posiciones x , para un corral elíptico con $a=35$, $b=21$. En el primer caso la primera impureza está fija en el foco izquierdo $(-28, 0)$ (a) y cuando está en el centro $(0, 0)$ de la elipse (b). En ambos casos, x está alejándose a lo largo del eje mayor. 42*

RESUMEN

En este trabajo, estudiamos los efectos cuánticos en las nanoestructuras metálicas. En primer lugar, investigamos los sistemas denominados corrales cuánticos. Analizamos la formación de la imagen cuántica de las impurezas no magnéticas en los corrales elípticos. Encontramos que para una impureza no magnética, la formación de una imagen cuántica así como su naturaleza, dependen tanto de la posición de la impureza como de la densidad electrónica superficial del metal matricial. Asimismo, analizamos los casos de los corrales circulares o cuadrados, en los cuales también ocurre la formación de la imagen cuántica. Por último, estudiamos los efectos de las interferencias cuánticas sobre la interacción entre dos impurezas no magnéticas colocadas en el interior del corral. Concluimos que los efectos de focalización de hecho afectan esa interacción.

ABSTRACT

This research is aimed at the study of quantum effects in metallic nanostructures. Firstly, systems known as quantum corrals were considered. The formation of quantum mirages of non-magnetic impurities in elliptical corrals was investigated. It was found that for non-magnetic impurities, the mirage formation depends not only on the position of the impurity but also on the host electronic density. Also, square and circular corrals, in which quantum mirages may appear, were studied. Additionally, the effect of quantum interference on the interaction between two non-magnetic impurities placed inside the corral was investigated. We found that, in fact, the focalization effects affect such interaction.

Capítulo 1

Introducción

Actualmente encontramos en la literatura muchas referencias respecto a la visionaria conferencia presentada por Richard P. Feynman en 1959. Esta conferencia llevó por título “Hay bastante espacio en el fondo” (There is Plenty of Room at the Bottom) y fue presentada en una reunión de la Sociedad Americana de Física [1]. En esta presentación, Feynman destacó que la ingeniería a escala nanométrica requería el desarrollo de instrumentos complejos, que actuarían como nuestros “ojos” y “dedos” en el nanomundo. Esta visión se haría realidad a partir de la década de 1970 gracias al desarrollo ocurrido en las técnicas de preparación y caracterización de las nanoestructuras.

La Nanociencia y la Nanotecnología incluyen la manipulación de la estructura y de la composición de materiales en la escala nanométrica, usualmente considerada en el orden de 1 a 100 nm. No solo representan el rumbo a niveles superiores de miniaturización, sino principalmente la riqueza de una nueva área de investigación fascinante y de gran relevancia tecnológica [2, 3, 4].

Un importante avance en el desarrollo de la Nanociencia y de la Nanotecnología ocurrió en los primeros años de la década de 1980, con la invención del *microscopio de barrido por efecto túnel* (Scanning Tunneling Microscope, (**STM**, por sus siglas

en inglés.) [5, 6, 7]. Este instrumento permite la determinación en el espacio real de la estructura superficial de un material, incluyendo sistemas no periódicos. Con un microscopio de tunelamiento es aún posible manipular átomos sobre la superficie de un material, construyendo así diversos tipos de nanoestructuras. En 1990, Don Eigler y E. Schweizer [8], del Centro de Investigación de la *IBM* en Almaden, utilizaron la punta de un microscopio de barrido por efecto túnel (STM) para formar la palabra *IBM* con átomos individuales sobre una superficie. Pocos años después, este grupo mostró cómo los electrones podrían ser confinados dentro de un círculo de átomos llamado “corral cuántico” [9]. En febrero del año 2000, Eigler y los colaboradores Hari Manoharam y Christopher Lutz [10] mostraron que los corrales cuánticos elípticos pueden ser usados para proyectar una imagen de un átomo magnético sobre otro punto en el interior de un corral cuántico construido sobre una superficie de cobre. Con este experimento, ellos presentaron un nuevo método de transporte de información, que podría ser utilizado eventualmente en la construcción de dispositivos nanométricos para su aplicación, por ejemplo, en el cálculo computacional.

La familia de instrumentos de prueba por barrido basados en el fenómeno de tunelamiento [11, 12], fue desarrollada en la década siguiente a la invención del STM; esta familia de instrumentos incluye: la microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscope, (AFM)), la microscopía de fuerza magnética (Magnetic Force Microscope, (MFM)), y la microscopía óptica de barrido de campo próximo (Scanning Near-field Optical Microscope, (SNOM)). Cada nuevo instrumento de prueba por barrido introduce un nuevo método para la investigación de las propiedades de los materiales a nivel nanométrico.

Gracias a los avances en el dominio de las técnicas de alto vacío, ocurridos a partir de la década de 1960, se desarrollaron diversas técnicas para la preparación de nanoestructuras, tales como la epitaxia de haces moleculares (*Molecular Beam Epitaxy* - MBE), deposición química de vapores de compuestos organo-metálicos

(*Metal Organic Chemical Vapor Deposition* - MOCVD) y sputtering, las que posibilitan la fabricación de películas ultrafinas, las estructuras de multicapas y los sistemas granulares. Tales sistemas muestran propiedades magnéticas y de transporte de gran interés científico y tecnológico, lo que ha llevado a un creciente número de investigaciones en dicha área.

El estudio de las propiedades de nanoestructuras y de sistemas nanoestructurados abarca los campos de la investigación científica y tecnológica. Una de las principales características de esta investigación hace posible el control de las propiedades de nanoestructuras encaminado a fines tecnológicos específicos. Esto se da a partir de la comprensión de la relación entre estas propiedades y aspectos relacionados con la geometría y la composición de los sistemas.

Una pregunta de gran relevancia en la física de nanoestructuras se refiere al papel de los efectos de interferencias cuánticas. Las interferencias cuánticas surgen del confinamiento parcial o total de los portadores de carga, en regiones con dimensiones comparables a la longitud de onda de las mismas. Ellas, por lo tanto, están íntimamente relacionadas a la geometría de las nanoestructuras y afectan directamente a sus propiedades físicas. El presente trabajo está dedicado al estudio de los efectos de las interferencias cuánticas en corrales cuánticos.

En el capítulo 2, introducimos la llamada “aproximación de enlace fuerte”, la cual tiene origen en el método denominado “combinación lineal de orbitales atómicos” de gran utilidad para la descripción de los estados electrónicos en un sólido. En este mismo capítulo, se incluye la técnica de las funciones de Green, las cuales representan un importante instrumento matemático para la determinación de la estructura electrónica de un sistema en Materia Condensada.

Cabe resaltar que las impurezas son de gran influencia en los sólidos, al modificar sus propiedades, ya sea actuando como centros dispersores, o permitiendo el *ajuste* de las propiedades electrónicas a través del intercambio de carga con el sólido ma-

tricial [13]. Las impurezas en los metales representan los centros dispersores para los electrones de conducción. En los materiales volumétricos, el blindaje del potencial asociado a la impureza resulta en el surgimiento de las oscilaciones de largo alcance en la densidad de carga del sistema alrededor de la impureza (son las llamadas oscilaciones de Friedel) [14, 15]. Las impurezas de algunos metales magnéticos cuando son colocadas en un metal no magnético pueden mantener un momento magnético, afectando las propiedades magnéticas y de transporte de la matriz.

Los sistemas denominados corrales cuánticos son estudiados en el capítulo 3. Estos sistemas están constituidos por átomos colocados sobre la superficie de un metal, los cuales forman un arreglo que delimita una porción de esta superficie y confina los estados electrónicos superficiales. De hecho, para las superficies compactas (111) de los metales nobles (Cu, Ag, y Au) existe un *gap* en la densidad de estados electrónicos de volumen. Los electrones de superficie son presionados por la barrera debido a la función trabajo en el lado del vacío, y por el *gap* de energía, del lado del metal (llamado estados Shockley), y forman un gas de electrón libre cuasi bidimensional (2D).

La longitud de onda de Fermi λ_F de este gas se encuentra típicamente en el intervalo de $20 - 40 \text{ \AA}$, que es significativamente mayor que λ_F para los electrones en el volumen. Estos sistemas son producidos y estudiados con el auxilio de los microscopios de tunelamiento. Los corrales cuánticos y la técnica de *STM* han permitido la investigación de importantes fenómenos, como el caos cuántico y la formación de imágenes cuánticas [16, 17, 18]. El fenómeno de caos cuántico puede ser observado en corrales de forma semejante a un estadio, que dan origen a órbitas clásicas caóticas [19, 20]. Esta constituye una importante área de investigación, que está fuera de los objetivos de nuestro trabajo.

Las impurezas en metales, ya sean magnéticas o no, han sido objeto de estudios sistemáticos desde el desarrollo de la teoría cuántica de los sólidos. En el caso de im-

purezas magnéticas diluidas, los primeros trabajos fueron desarrollados por Anderson [21] y por Wolff [22] y, posteriormente, mejorados por Clogston [23]. Igualmente importante fue el estudio del llamado efecto Kondo, el cual consiste básicamente en la condensación de los electrones de conducción del material matricial alrededor de la impureza, lo cual compensa su momento magnético [24, 25]. Sin embargo, la formación de una imagen en un corral cuántico representa un nuevo e interesante efecto.

Basados en la idea de que este efecto se debe fundamentalmente a las interferencias cuánticas en el interior de la elipse, analizamos en el capítulo 4 el caso de una impureza no magnética colocada en diversos puntos de la elipse. Este estudio se basa en un modelo simple para la descripción de la estructura electrónica del sistema. Además, analizamos los casos de los corrales con diferentes formas, entre ellas las circulares y rectangulares.

En relación a las impurezas en corrales cuánticos, investigamos el problema de dos impurezas no magnéticas en el interior del corral. Nuestro interés se centró en el estudio del papel de las interferencias cuánticas sobre la energía de interacción entre las impurezas. En el caso de los corrales elípticos, buscamos verificar en qué medida las interferencias cuánticas resultantes de las reflexiones en las paredes del corral afectan la interacción entre las impurezas. Por último, calculamos la energía de interacción entre las dos impurezas en función de sus posiciones dentro de la elipse.

Finalmente, en el capítulo 5, presentamos las conclusiones y las perspectivas de nuestro trabajo.

Capítulo 2

Aproximación de enlace fuerte y funciones de Green

En 1928 F. Bloch modeló electrones fuertemente ligados a los átomos, cuyas funciones de onda solamente se superponían débilmente a sus vecinos. Esta aproximación de enlace fuerte (*tight-binding*, (*TB*, por sus siglas en inglés.)) fue formalizada por Gregory Wannier en 1937, quien demostró que las funciones de Bloch pueden ser siempre sumadas para obtener un conjunto completo de funciones de onda que poseen una amplitud considerable únicamente en átomos individuales. Los modelos basados en estas funciones de onda localizadas, han sido el punto de inicio para las investigaciones de los electrones en los metales, a pesar de que no existe un sistema físico que se encuentre particularmente representado en forma precisa por ningún modelo de enlace fuerte simple [26].

En el presente trabajo, estamos interesados principalmente en los sólidos compuestos por átomos cuyos electrones de valencia ocupan orbitales atómicos razonablemente localizados en los sitios respectivos. Estos estados forman una banda de conducción relativamente estrecha en el sólido, que se encuentra parcialmente ocupada. De esta manera, adoptamos el modelo de enlace fuerte para describir la es-

estructura electrónica del sistema. Con respecto a dicho formalismo, empleamos las funciones de Green que son calculadas en la base de los orbitales atómicos y, a partir de ellos, podemos calcular todas las propiedades mono-electrónicas de interés [27, 28, 29].

2.1. Aproximación de enlace fuerte

Dentro de la aproximación de un electrón, los estados electrónicos satisfacen una ecuación diferencial de la forma

$$\left[\frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] \phi_\alpha(\vec{r}) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\vec{r}). \quad (2.1)$$

Diversos métodos fueron desarrollados para la obtención de las soluciones de esta ecuación. Uno de esos métodos, que se basa en la llamada “aproximación de enlace fuerte,” destaca por su simplicidad y flexibilidad. Este método de enlace fuerte se aplica a sistemas periódicos o no periódicos, y se supone que los estados electrónicos del sólido en una determinada banda de energía pueden ser descritos como combinaciones lineales de algunos orbitales atómicos centrados en los sitios \vec{R} de la red. Esto es adecuado particularmente en los sólidos compuestos por átomos cuyos electrones de valencia ocupan orbitales atómicos razonablemente localizados en los sitios respectivos y que dan origen a las bandas relativamente estrechas.

A continuación, presentamos una rápida descripción de esta aproximación [30]. Usando la notación de Dirac, escribimos

$$|\phi_\alpha\rangle = \sum_{\mu, \vec{R}} b_{\alpha\mu\vec{R}} |\mu\vec{R}\rangle, \quad (2.2)$$

donde $|\mu\vec{R}\rangle$ representa el orbital atómico μ centrado en el sitio \vec{R} de la red y $\{b_{\alpha\mu\vec{R}}\}$ son los coeficientes a ser determinados. Supongamos que el potencial $U(\vec{r})$ sea dado por la superposición de potenciales atómicos centrados en los sitios de la red.

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} V_{\vec{R}}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

y que los orbitales atómicos satisfacen la ecuación

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V_{\vec{R}}(\vec{r}) \right] |\mu \vec{R}\rangle = \varepsilon_{\mu \vec{R}} |\mu \vec{R}\rangle, \quad (2.4)$$

donde $\varepsilon_{\mu \vec{R}}$ son las energías atómicas. Suponemos, además, que la superposición entre las funciones centradas en sitios distintos sea despreciable, de modo que la ecuación

$$\langle \mu \vec{R} | \mu' \vec{R}' \rangle = \delta_{\vec{R} \vec{R}'} \delta_{\mu \mu'} \quad (2.5)$$

representa la condición de ortonormalidad. En esta aproximación está implícito el carácter localizado de los orbitales atómicos.

Substituyendo la expansión (2.2) y (2.3) en la ecuación (2.1) y usando la condición de ortonormalidad (2.5) de los orbitales, obtenemos

$$\sum_{\vec{R}, \mu} \left[\varepsilon_{\mu \vec{R}} \delta_{\vec{R} \vec{R}'} \delta_{\mu \mu'} + \sum_{\vec{R}'' (\neq \vec{R}')} \langle \mu', \vec{R}' | V_{\vec{R}''}(\vec{r}) | \mu, \vec{R} \rangle \right] b_{\alpha \mu \vec{R}} = \varepsilon_{\alpha} b_{\alpha \mu' \vec{R}'} \quad (2.6)$$

Esta es la ecuación de autovalores que va a permitir obtener las posibles energías para el sólido y puede ser escrita de forma compacta como,

$$\sum_{\vec{R}, \mu} H_{\vec{R}' \vec{R}}^{\mu' \mu} b_{\alpha \mu \vec{R}} = \varepsilon_{\alpha} b_{\alpha \mu' \vec{R}'} \quad (2.7)$$

donde

$$H_{\vec{R}' \vec{R}}^{\mu' \mu} = \varepsilon_{\mu \vec{R}} \delta_{\vec{R} \vec{R}'} \delta_{\mu \mu'} + \sum_{\vec{R}'' (\neq \vec{R}')} \langle \mu', \vec{R}' | V_{\vec{R}''} | \mu, \vec{R} \rangle \quad (2.8)$$

Para obtener las soluciones no triviales para los coeficientes $b_{\alpha \mu \vec{R}}$ en la ecuación (2.7) debemos considerar que

$$\det(\varepsilon_{\alpha} I - H) = 0 \quad (2.9)$$

donde I es la matriz de identidad. Una de las ventajas del método de enlace fuerte es justamente substituir la solución de una ecuación diferencial parcial por la solución de un problema de autovalores, lo que en el cálculo computacional es mucho más simple.

Los términos en la sumatoria en (2.8) pueden ser reunidos en dos grupos: los no diagonales en los índices \vec{R} de sitio y los diagonales. Dentro de los primeros, los más importantes son las denominadas *integrales de transferencia* (“*hopping integrals*”)

$$t_{\vec{R}'\vec{R}}^{\mu'\mu} = \langle \mu', \vec{R}' | V_{\vec{R}} | \mu, \vec{R} \rangle, \quad (2.10)$$

siendo las demás, denominadas *integrales de tres centros*, $\langle \mu', \vec{R}' | V_{\vec{R}''} | \mu, \vec{R} \rangle$, con $\vec{R}'' \neq \vec{R}'$ y $\vec{R}'' \neq \vec{R}$, que son mucho menores que las integrales de transferencia y que son usualmente despreciados. Dentro de los términos diagonales, los más importantes son también diagonales en los índices μ de orbitales, $\sum_{\vec{R}'' (\neq \vec{R})} \langle \mu, \vec{R} | V_{\vec{R}''} | \mu, \vec{R} \rangle$, denominados *corrección de campo cristalino*, que pueden ser absorbidos en el término de energía atómica, renormalizándolos. Así, el hamiltoniano de enlace fuerte toma la forma

$$H_{\vec{R}'\vec{R}}^{\mu'\mu} = \varepsilon_{\mu\vec{R}} \delta_{\vec{R}\vec{R}'} \delta_{\mu\mu'} + t_{\vec{R}'\vec{R}}^{\mu'\mu} (1 - \delta_{\vec{R}\vec{R}'}). \quad (2.11)$$

2.1.1. Sistemas cristalinos

En el caso de un cristal, las energías atómicas no dependen de \vec{R} y, al mismo tiempo, las integrales de transferencia solo dependen de $|\vec{R}_1| = |\vec{R}' - \vec{R}|$, o sea, $t_{\mu'\mu}(\vec{R}_1) = t_{\vec{R}'-\vec{R}}^{\mu'\mu}$. Esto permite que el hamiltoniano sea parcialmente diagonalizado a través de la transformación unitaria

$$| \mu, \vec{k} \rangle = \frac{1}{N_I^{1/2}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | \mu, \vec{R} \rangle, \quad (2.12)$$

para \vec{k} en la primera zona de Brillouin y N_I es el número de sitios de la red, que nos permite obtener

$$H_{\mu'\mu}(\vec{k}) = \varepsilon_{\mu} \delta_{\mu\mu'} + t_{\mu'\mu}(\vec{k}). \quad (2.13)$$

En esta expresión,

$$t_{\mu'\mu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_1} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_1} t_{\mu'\mu}(\vec{R}_1). \quad (2.14)$$

La dimensión de la matriz, que representa el hamiltoniano, es dada por el número de orbitales atómicos considerados en la expansión (2.2) y éste depende del ancho de energía dentro de la cual se busca obtener los estados electrónicos del sólido. La estructura de banda del sólido se obtiene diagonalizando $H(\vec{k})$ en los índices de orbitales, esto es, pasando de los estados $\{|\mu, \vec{k}\rangle\}$ a los estados $\{|n, \vec{k}\rangle\}$, obteniendo entonces $\varepsilon_{n\vec{k}}$.

2.2. Funciones de Green

La función de Green asociada a un Hamiltoniano (H) es definida como

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad (2.15)$$

donde la energía z puede asumir valores complejos. La razón para introducir esta función es que contiene informaciones relevantes sobre el sistema descrito por H , las cuales pueden ser obtenidas con un esfuerzo computacional menor de lo que es necesario para resolver la ecuación (2.1).

En la base $\{|\phi_\alpha\rangle\}$ de los autovectores de H , este se escribe como

$$H = \sum_{\alpha} |\phi_\alpha\rangle \varepsilon_\alpha \langle \phi_\alpha|, \quad (2.16)$$

donde ε_α es el autovalor asociado a $|\phi_\alpha\rangle$. Esto nos permite obtener la expresión

$$G(z) = \sum_{\alpha} |\phi_\alpha\rangle \frac{1}{z - \varepsilon_\alpha} \langle \phi_\alpha|, \quad (2.17)$$

que es conocida como *representación de Lehmann*. Esta expresión nos muestra que $G(z)$ presenta polos (o cortes, en el caso de un espectro continuo) a lo largo del eje real. Así, es conveniente introducir las funciones de Green retardada, $G^+(E) = G(E + i\eta)$, y avanzada, $G^-(E) = G(E - i\eta)$, donde $E \in \mathbb{R}$ y η es una cantidad infinitesimal positiva. A partir de estas funciones, podemos obtener la densidad de

estados electrónicos de H , definida como

$$\rho(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - \varepsilon_{\alpha}). \quad (2.18)$$

La densidad de estados también puede ser expresada en términos de la función de Green del sistema. Usando la relación

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\eta} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (2.19)$$

donde P significa el valor principal de Cauchy de la integral. De hecho, usando

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left\{ \frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha} + i\eta} \right\} = -\pi \delta(E - \varepsilon_{\alpha}), \quad (2.20)$$

obtenemos la densidad de estados como

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} [G^+(E)] \quad (2.21)$$

Otra cantidad física de interés es la densidad de estados proyectada en un punto, también denominada densidad de estados local, la cual es definida como

$$\rho(E, \vec{r}) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}). \quad (2.22)$$

De acuerdo con la notación

$$\int dE f_{FD}(E) \rho(E, \vec{r}) = n(\vec{r}) \quad (2.23)$$

donde $f_{FD}(E)$ es la función de Fermi-Dirac, o sea, la integral de $\rho(E, \vec{r})$, sobre los estados ocupados, obtenemos la densidad de partículas, la cual desempeña un papel importante en la teoría electrónica de los sólidos. En el caso del modelo de enlace fuerte, la densidad de estado local en cada sitio atómico es dada por

$$\rho(E, \vec{R}) = \sum_{\mu} \rho_{\mu}(E, \vec{R}) \quad (2.24)$$

donde $\rho_\mu(E, \vec{R})$ es la componente de la densidad de estados local asociada al orbital μ , definida como

$$\rho_\mu(E, \vec{R}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \mu \vec{R} | G^+(E) | \mu \vec{R} \rangle \quad (2.25)$$

$$= \sum_{\alpha} |b_{\alpha\mu\vec{R}}|^2 \delta(E - \varepsilon_{\alpha}). \quad (2.26)$$

La importancia de las funciones de Green y de sus propiedades, discutidas anteriormente, nos permiten entender la teoría del STM y su aplicación a los corrales cuánticos, como veremos más adelante [31].

Capítulo 3

Bases teóricas de los corrales cuánticos

El espectacular desarrollo de la técnica del microscopio de barrido por efecto túnel (STM) hizo posible la medición local de las propiedades electrónicas con resolución espacial en la escala de longitudes atómicas, así como la manipulación individual de los átomos en las superficies metálicas [8]. Gracias a esto, se construyeron diversas estructuras compuestas por átomos absorbidos en la superficie de algunos metales y se observaron sus propiedades [31].

Uno de los experimentos más destacados fue el realizado por el grupo de la IBM, en Almadén [10], en el cual se observó el surgimiento de un curioso efecto de formación de una imagen cuántica (figura (3.1)). Utilizando el microscopio de barrido por efecto túnel (STM), los átomos de Co fueron depositados sobre la superficie (111) del Cu, lo que motivó la formación de una elipse de dimensiones nanométricas, con un átomo de Co en su interior. Cabe señalar que la superficie (111) de los metales nobles presenta un estado electrónico superficial desacoplado de los estados del volumen [32], lo cual queda incluido en el interior de la elipse. El fenómeno, todavía más interesante, está relacionado al átomo de Co adicional (impureza), situado dentro

de la elipse. Con el auxilio de un STM, se observa una clara señal asociada a una resonancia Kondo en el sitio de la impureza [10]. Por lo tanto, según lo estudiado por Manoharan y colaboradores, cuando esta impureza se localiza en uno de los focos de la elipse, se observa una señal Kondo en el foco desocupado [10].

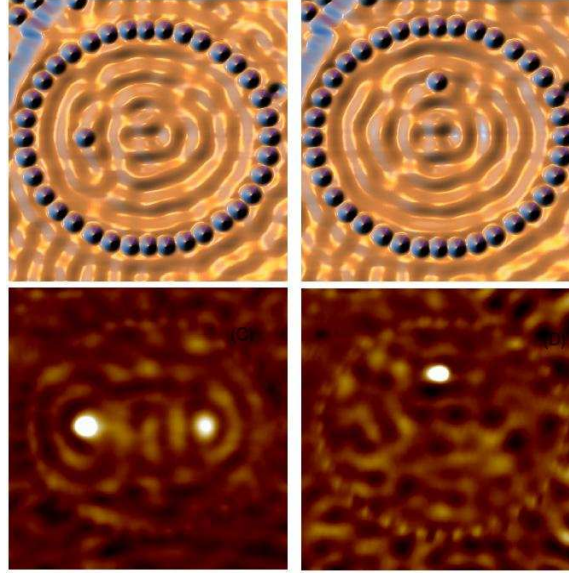


Figura 3.1: Las dos primeras figuras arriba muestran las topografías observadas con el STM y las dos figuras de abajo muestran los mapas espectrales asociados [33]. Cuando un átomo de Co se localiza en un foco del corral cuántico elíptico (izquierda superior), el efecto Kondo es evidente en ambos focos (izquierda inferior). Cuando el átomo es localizado en otro lugar de la elipse (derecha superior), no aparece la imagen cuántica (derecha inferior).

El fenómeno de formación de una imagen, resulta del carácter ondulatorio de los electrones y de la existencia de interferencias cuánticas, entre la onda incidente y la onda reflejada por las paredes del corral. El estudio de Manoharan *et al.* representa una de las más espectaculares ilustraciones de dichos efectos. Tal estudio motivó la presente investigación relacionado con las impurezas en corrales elípticos, en los

siguientes puntos:

1. impureza no magnética - formación de la imagen cuántica; naturaleza de la imagen.
2. impureza magnética - formación de una imagen magnética; orientación relativa de los momentos magnéticos del objeto y de la imagen.
3. interacción entre impurezas no magnéticas.

A continuación, presentamos inicialmente una discusión breve de los principios de funcionamiento de un STM y discutimos algunos aspectos asociados al experimento de Manoharan *et al.* [10], para luego tratar los puntos mencionados arriba.

3.1. Principio básico del Microscopio de Efecto Túnel (STM)

El STM fue desarrollado por G. Binnig y H. Rohrer en el laboratorio de investigación de la IBM en Zúrich, Suiza, al final de la década de 1970 e inicio de 1980 [6]. El componente clave del STM es una punta metálica, frecuentemente hecha de tungsteno, níquel, oro o platino. Dicha punta está montada dentro de un mecanismo de elementos piezo-eléctricos que controlan su posición en tres dimensiones. Estos elementos piezo-eléctricos tienen la propiedad de contraerse o de expandirse cuando se les aplica un voltaje; además, también generan pequeñas corrientes cuando son flexionados o comprimidos. Son usualmente hechos de cerámica muy dura, de modo que los movimientos inducidos por el voltaje pueden ser menores que un décimo de nanómetro; esto permite un control muy fino y necesario para la obtención de la imagen y la manipulación a nivel atómico y molecular.

A distancias muy pequeñas, las nubes electrónicas de los átomos en la punta metálica comienzan a superponerse con los átomos de la superficie de la muestra.

Así, cuando un voltaje es aplicado, los efectos cuánticos permiten el paso de los electrones a través de la pequeña separación entre la punta y la superficie, creando una corriente pequeña pero medible. Esta corriente es muy sensible a la distancia entre la punta y la superficie, incrementándose exponencialmente cuando la punta se aproxima a la superficie. Puesto que la corriente aumenta rápidamente cuando la distancia disminuye, existen cambios muy pequeños – menores que una décima parte de un nanómetro – en la posición de la punta que pueden ser detectadas cerca de la superficie.

Para generar la imagen, la punta es movida hacia atrás y hacia adelante a lo largo de la muestra, en intervalos muy pequeños. Cuando la aguja examina la superficie, su altura se ajusta continuamente para conservar constante la corriente de tunelamiento, elevándose para después deslizarse sobre las irregularidades y descender en el vacío. Estos ajustes frecuentemente originan una especie de mapa topográfico de la superficie de la muestra a escala atómica (figura (3.2)).

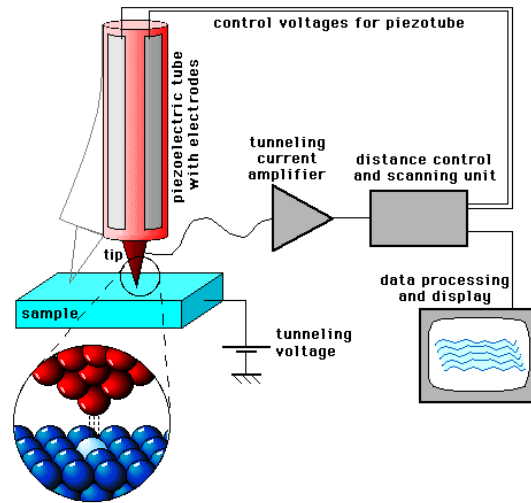


Figura 3.2: *Representación esquemática de la separación superficie-punta del STM [34].*

3.1.1. Teoría STM

Para el tratamiento teórico del problema del STM, es necesario lo siguiente: una descripción del potencial electrónico de la región (gap) entre la punta y la superficie de la muestra, una descripción detallada de los estados electrónicos tanto de la muestra como de la punta y la determinación de la cola de la función de onda de los electrones en el gap, entre la punta y la superficie. Es más complicado calcular funciones de onda exactas que energías totales, de modo que los cálculos de la función de onda de la punta son muy complicados. Además de eso, la punta y la muestra pueden interactuar tan fuertemente que la punta, el gap y la muestra deben ser considerados como un sistema completo y no como sistemas separados. Por esta razón, el desarrollo teórico en el campo del STM ha sido limitado en comparación con el desarrollo experimental.

Las diferentes teorías de tunelamiento se basan en el “Hamiltoniano de transferencia perturbativa”, formalismo introducido por Bardeen [35]. Aquí la interacción entre los dos electrodos es suficientemente débil para ser despreciada y la corriente de tunelamiento puede ser calculada a partir de las autofunciones Ψ_μ y Ψ_ν , con autoenergías E_μ y E_ν , de la punta y de la muestra, respectivamente. En este formalismo, la corriente de tunelamiento I_t es calculada a partir de la superposición de las colas de Ψ_μ y Ψ_ν en la región de la barrera de tunelamiento (gap), obteniendo

$$I_t = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\nu, \mu} f(E_\mu) [1 - f(E_\nu + eV_t)] |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu), \quad (3.1)$$

donde e es la carga del electrón, $\hbar = h/2\pi$ y el elemento de la matriz de tunelamiento es dada por:

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{S_0} d\vec{S} \cdot (\Psi_\mu^* \nabla \Psi_\nu - \Psi_\nu \nabla \Psi_\mu^*). \quad (3.2)$$

donde m es la masa del electrón y la integral es sobre cualquier superficie S_0 que contenga la región de la barrera. La cantidad entre paréntesis es justamente el operador corriente. La función delta en la ecuación (3.1) implica que el electrón no pierde

energía durante el tunelamiento (tunelamiento elástico). En cuanto a la función de distribución Fermi-Dirac ($f(E)$) toma en cuenta que el tunelamiento ocurre, por ejemplo, de un estado de la punta ocupado a un estado de la muestra vacío. El desnivel de energía eV_t es el resultado de la caída del voltaje de tunelamiento V_t .

Formalismo de Tersoff-Hamann

Tersoff y Hamann [7] fueron los primeros en tratar el problema del tunelamiento en el STM basándose en el hamiltoniano de transferencia. La dificultad en ese cálculo reside en evaluar el elemento de matriz $M_{\mu\nu}$ o, equivalentemente, en modelar las funciones de onda de la superficie y de la punta. Ellos consideraron el límite de V_t pequeño e hicieron la suposición de que la punta sea esférica, con un radio de curvatura R , y por lo tanto pueda ser descrita apenas por funciones de onda- s que son esféricamente simétricas. Con estas suposiciones, Tersoff y Hamann obtuvieron la siguiente expresión para la conductancia de tunelamiento:

$$G_t = \frac{I_t}{V_t} \approx 0,1 R^2 e^{2\kappa R} \rho_S(\vec{r}_t, E_F) \quad (3.3)$$

y

$$\rho_S(\vec{r}_t, E_F) = \sum_{\nu} |\Psi_{\nu}(\vec{r}_t)|^2 \delta(E_{\nu} - E_F), \quad (3.4)$$

donde $\rho_S(\vec{r}_t, E_F)$ es la densidad de estado local (*LDOS*) de la superficie de la muestra en el nivel de Fermi calculada en la posición central \vec{r}_t de la punta, $\kappa = \hbar^{-1}(2m\phi)^{1/2}$ es la longitud de decaimiento de la función de onda en el vacío y ϕ es la altura de la barrera del tunelamiento relativo al nivel de Fermi, E_F . Dentro de este modelo, la topografía STM de corriente constante tiene una interpretación simple como contorno de $\rho_S(\vec{r}_t, E_F)$, esto es, estas funciones solamente reflejan las propiedades de la muestra y no del sistema complejo punta-muestra.

Dentro del formalismo de Tersoff y Hamann es posible hacer estimaciones aproximadas de un número de factores importantes que limitan la resolución atómica en

imagenes STM. Puesto que $|\Psi_\nu(\vec{r}_t)|^2 \propto e^{-2\kappa(R+z)}$, observamos que la conductancia de tunelamiento es dada por

$$G_t = \frac{I_t}{V_t} \propto e^{-2\kappa z} = \exp(-1,025 \sqrt{(\phi)} z), \quad (3.5)$$

(ϕ en eV y z en \AA) y la conductancia de tunelamiento consecuentemente decae exponencialmente con el incremento de la distancia z entre la punta y la superficie.

3.2. Imagen cuántica de impurezas en corrales elípticos

Cuando un electrón es confinado en la escala del orden de la longitud de onda de de Broglie, su comportamiento es dominado por los efectos cuánticos. Los electrones que ocupan los estados de superficie en metales nobles forman un gas de electrón libre cuasi bidimensional (*2DEG*). El movimiento electrónico paralelo a la superficie puede, por tanto, ser confinado por impurezas convenientemente localizadas sobre la superficie, como los corrales cuánticos. Los efectos de confinamiento pueden entonces ser observados con la técnica STM.

Las figuras (3.3) muestran imagenes de algunos corrales cuánticos producidos por átomos de *Fe* en la superficie de *Cu*.

Recordemos que para determinar el estado de *2DEG*, es decir, qué estados son ocupados a $T = 0 \text{ K}$ debemos tomar en cuenta el *principio de Pauli*, que establece que dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos (orbitales y de espín). Matemáticamente, este principio es satisfecho exigiéndose que la *función de onda total de los electrones sea antisimétrica*. El principio de Pauli crea *correlaciones* en el movimiento de los electrones de un sistema, con importantes consecuencias para las propiedades magnéticas y de conducción de los materiales.

Ya ha sido demostrado que el *STM* posibilita nuevas maneras de estudiar el confinamiento electrónico y los efectos de dimensión reducida en los metales. En

particular, se origina de la teoría vista anteriormente que la corriente de tunelamiento de un STM da una medida de la densidad local de estados en el nivel de Fermi E_F de la superficie.

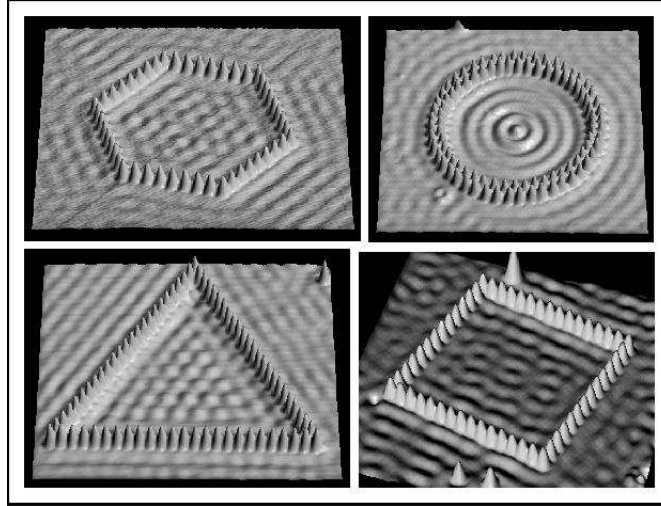


Figura 3.3: La figura muestra los patrones de interferencia cuántica que se forman en el interior de los corrales cuánticos de diferentes formatos obtenidos por STM. Los efectos de confinamiento del electrón son evidentes ([36]).

Recientemente diversos grupos de investigadores demostraron, a través del STM [37, 38, 10], que una impureza magnética absorbida en la superficie de un metal normal origina una estructura estrecha y de resonancia similar en las densidades de estados de la superficie, cuya forma asimétrica se asemeja a la resonancia de Fano¹. Los experimentos fueron realizados con átomos individuales de Ce sobre la superficie de Ag [37], así como con átomos individuales de Co sobre las superficies de Au [38] y Cu [10] por medio de la evaluación de la característica corriente versus voltaje (I-V) de la corriente de tunelamiento a través de la punta del STM colocada cerca de la superficie y a una pequeña distancia de la impureza magnética.

¹El problema fue originalmente considerado por Fano en 1935 y después revisado por el mismo autor con el formalismo de la función de Green [39, 40].

Un átomo magnético en una matriz no magnética es a veces referido como una impureza Kondo. El espín de la impureza interactúa con el espín de los electrones de conducción del material matricial y esa interacción resulta en una especie de condensación del espín alrededor de la impureza que es antiparalela al momento magnético de la impureza (*Kondo cloud*). Este efecto, además, de afectar la respuesta magnética del sistema, conduce a propiedades de transportes anómalas en aleaciones magnéticas diluidas (el efecto Kondo). Este efecto ha sido observado en diferentes sistemas, incluyendo impurezas magnéticas simples sobre las superficies [10, 38] y puntos cuánticos [41].

En la superficie de $Cu(111)$ se forma un gas de electrones libres bidimensionales. Estos electrones ocupan una banda de estado de superficie, la cual se inicia $450mV$ abajo de la E_F . Los átomos de Co situados sobre la superficie son inmersos dentro del mar de electrones bidimensionales, dando origen a barreras que permiten confinar el gas de electrones a una región de la superficie. Este hecho es esencial, puesto que es precisamente la presencia de ese potencial de confinamiento el que irá a posibilitar la formación de una *imagen cuántica*. En el experimento de Manoharan y colaboradores [10], se formó un corral elíptico con los átomos de Co , como se muestra en la figura (3.1).

Como se indicó anteriormente, Manoharan *et al.* [10] observaron que cuando un átomo adicional de Co se localizaba en uno de los focos de la elipse, una imagen magnética de la misma se formaba en el otro foco. Las dos primeras imágenes de la figura (3.1) muestran la topografía STM de uno de los resonadores cuando la impureza magnética es localizada en dos posiciones distintas. El mapa dI/dV nos da una visión de la polarización de espín del gas de electrones dentro del corral cuántico.

Capítulo 4

Modelo de enlaces fuertes en los corrales cuánticos

Consideraremos para la descripción del sistema de corrales cuánticos, el modelo de enlaces fuertes con un orbital por sitio y con integrales de transferencia solo entre los primeros sitios vecinos. La razón para esta elección es el hecho de que ese modelo incorpora los efectos cuánticos que deseamos estudiar, siendo todavía simple de abordar desde el punto de vista computacional. Estaremos interesados en estudiar los estados electrónicos de superficie. Por lo tanto, consideraremos una red cuadrada, donde los sitios son especificados por un índice i . De esa forma, el orbital atómico centrado en cada sitio puede ser especificado en la forma $|i\rangle$.

El hamiltoniano de enlaces fuertes que utilizamos para describir una de las subbandas discutidas arriba tiene, por lo tanto, la forma:

$$H = \sum_i |i\rangle \varepsilon_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle t_{ij} \langle j|, \quad (4.1)$$

donde ε_i es la energía orbital atómica en el sitio i y t_{ij} son las integrales de transferencia entre los primeros vecinos que tomamos igual a $t = -0,5$.

Una vez que el hamiltoniano H es escrito en la forma matricial tenemos que diagonalizar el hamiltoniano para calcular los autovalores y autovectores del sistema

bidimensional. A partir de estos resultados, podemos estudiar la distribución espacial de la amplitud de probabilidad de los diferentes autoestados del sistema. Esas distribuciones nos muestran, de manera clara, los efectos de interferencias cuánticas debidos al confinamiento de los electrones en la superficie del material matricial por los átomos que forman el corral.

4.1. Sistemas sin impurezas

Como el papel de las impurezas en el borde del corral es el de confinar los electrones, podemos entonces tomar un sistema *finito* constituido por la región interna del corral. Una elipse es el conjunto de puntos del plano xy , tales que $d(P, F_1) + d(P, F_2) = 2a$. La ecuación de la elipse con centro en el origen $(0, 0)$ y eje focal x es dada por

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \quad (4.2)$$

La elipse tiene dos puntos focales con coordenadas $(\pm c, 0)$, donde $c = \sqrt{a^2 - b^2}$, y su excentricidad es definida por $e = \frac{c}{a}$; donde a es el semi-eje mayor y b es el semi-eje menor. El área de la elipse es $A = \pi ab$.

Cuadro 4.1: *Tabla de los parámetros de la elipse de excentricidad $e = 0,8$, donde a es el semi-eje mayor, b es el semi-eje menor, c la distancia focal, N_s el número de átomos que conforman la elipse, a_0 es el parámetro de red y A el área de la elipse.*

a	b	c	N_s	A
$20a_0$	$12a_0$	$\pm 16a_0$	749	$240\pi a_0^2$
$25a_0$	$15a_0$	$\pm 20a_0$	1173	$375\pi a_0^2$
$30a_0$	$18a_0$	$\pm 24a_0$	1677	$540\pi a_0^2$
$35a_0$	$21a_0$	$\pm 28a_0$	2293	$735\pi a_0^2$

Cuadro 4.2: *Tabla de los parámetros de la elipse de excentricidad $e = 0,6$, donde a es el semi-eje mayor, b es el semi-eje menor, c la distancia focal, N_s el número de átomos que conforman la elipse, a_0 es el parámetro de red y A el área de la elipse.*

a	b	c	N_s	A
$20a_0$	$16a_0$	$\pm 12a_0$	993	$320\pi a_0^2$
$25a_0$	$20a_0$	$\pm 15a_0$	1559	$500\pi a_0^2$
$30a_0$	$24a_0$	$\pm 18a_0$	2253	$720\pi a_0^2$
$35a_0$	$28a_0$	$\pm 21a_0$	3063	$980\pi a_0^2$

Las tablas (4.1) y (4.2) muestran los diferentes parámetros que conforman la elipse, así como los valores de números de sitios N_s para dos diferentes excentricidades de las elipses que estudiaremos en este trabajo.

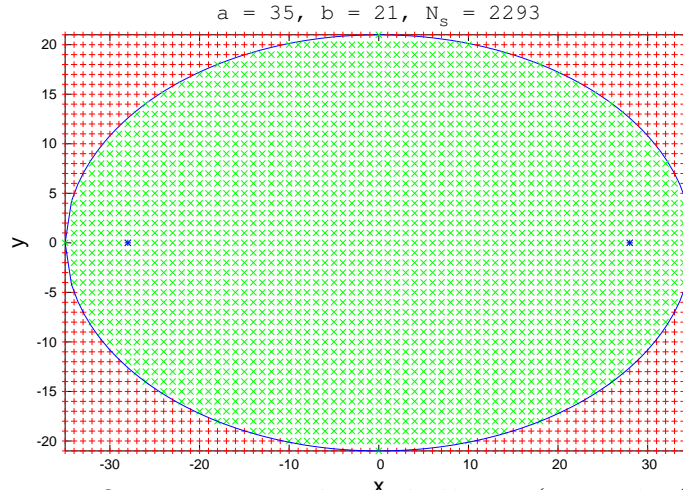


Figura 4.1: *La figura muestra el corral elíptico (ecuación (4.2)), donde la línea continua (color azul) representa el contorno donde el potencial es infinito.*

Consideremos, en primer lugar, el caso de un corral elíptico con 2293 átomos y

sin impurezas, como se aprecia en la figura (4.1). La línea continua en esta figura representa el contorno donde el potencial es infinito. La matriz H es diagonalizada en el espacio real, obteniendo los autoestados y autovalores del sistema. Todos nuestros resultados numéricos de aquí para adelante se referirán a un corral elíptico con dimensiones $a = 35a_0$ y $b = 21a_0$, donde $a_0 = 1$, es el parámetro de red.

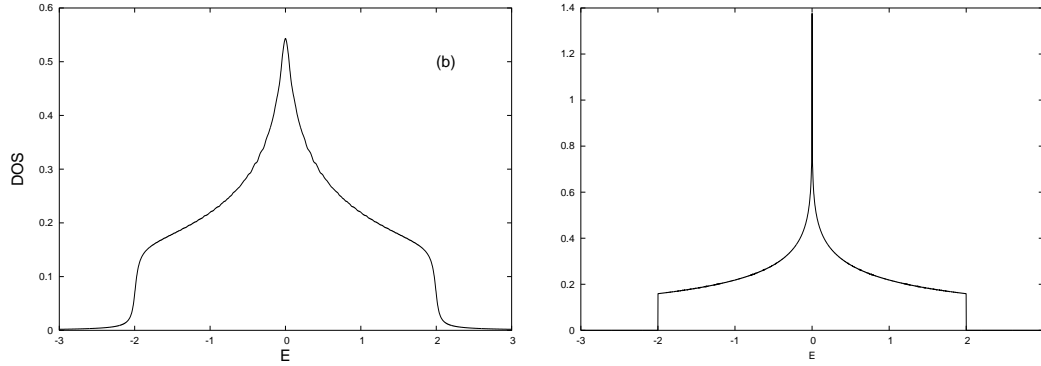


Figura 4.2: Las figuras muestran la densidad de estado total versus energía para el mismo corral elíptico y para la red infinita bidimensional [27], respectivamente.

Las autoenergías del sistema se distribuyen en el intervalo de $(-2, 2)$, asumiendo la unidad de energía tal que $2|t| = 1$; siendo la curva de densidades de estados mostrada en la figura (4.2), donde introducimos un alargamiento en las funciones delta de Dirac

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_m \frac{1}{E - E_m + i\eta}, \quad (4.3)$$

donde usamos la ecuación (2.18) estudiada en el capítulo 2, y E_m son los autovalores del hamiltoniano sin impurezas (H_0) y $\eta = 0,05 t$.

Observamos que los estados presentan degenerescencias, que se torna más pronunciada en el centro de la banda. Es clara la semejanza entre la densidad de estados para este sistema (figura (4.2)) y de una red infinita bidimensional (figura (4.2)), semejanza que se torna mayor a medida que las dimensiones de la elipse crecen. Por

lo tanto, los efectos de confinamiento se hacen notar en el carácter discontinuo del espectro y en la estructura de la curva.

La densidad de partículas en cada sitio j dentro del corral asociada a los k -ésimo estado es dada por:

$$\rho_k(j) = |\langle j | \psi_k \rangle|^2. \quad (4.4)$$

Definimos la densidad espacial de partículas por

$$\begin{aligned} \rho(j, M) &= \sum_{k \leq M} |\langle j | \psi_k \rangle|^2, \\ &= |\langle j | \psi_1 \rangle|^2 + |\langle j | \psi_2 \rangle|^2 + \cdots + |\langle j | \psi_M \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Para cada valor de M (estado ocupado), la concentración electrónica n es dada por

$$n = \sum_j \sum_{k \leq M} |\langle j | \psi_k \rangle|^2 \quad (4.6)$$

y la energía electrónica por sitio de los electrones por:

$$E_s = \frac{1}{N_s} \sum_{k \leq M} \varepsilon_k \quad (4.7)$$

donde las energías ε_k están ordenadas de modo que $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3 < \dots$

La figura (4.3) muestra las curvas de densidad de probabilidad en corrales elípticos para distintos autovalores. Vemos claramente en esas figuras los efectos de las interferencias cuánticas sobre las funciones de onda, debido a las reflexiones en los bordes de los corrales.

En la figura (4.3) se muestran los gráficos para los estados $k = 1, 12, 81, 92$. Vemos que el estado 1 (estado fundamental), por ejemplo, tiene una alta probabilidad en el centro de la elipse ($x = 0, y = 0$). Observemos que las densidades de probabilidad van a cero en los bordes de la elipse. En la misma figura (4.3) podemos observar que para algunos estados las densidades de probabilidades son máximas en los focos de la elipse, debido a los efectos de interferencia cuántica.

La figura (4.4) muestra algunas secciones de la superficie de probabilidad para el estado $k = 12$. En la parte superior de la figura mostramos la superficie $\rho_k(j)$

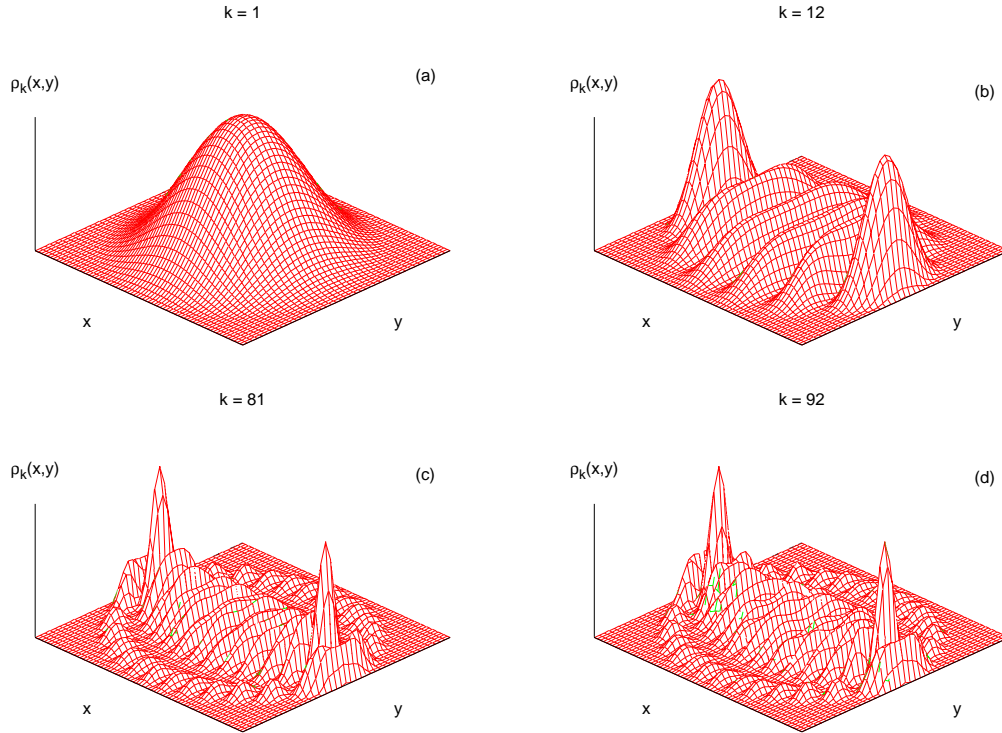


Figura 4.3: Densidad de probabilidad $\rho_k(x, y)$ versus la posición (x, y) para los estados $k = 1, 12, 81$, y 92 , con autovalores: $\varepsilon_1 = -1,99568$, $\varepsilon_{12} = -1,95805$, $\varepsilon_{81} = -1,76764$ y $\varepsilon_{92} = -1,74021$, respectivamente. La figura (a) representa el estado fundamental y las figuras (b), (c) y (d) representan los estados donde la densidad de probabilidad es mayor en los focos del mismo corral elíptico sin impurezas.

para toda la region de la elipse, mientras que en la parte inferior se representa la sección a lo largo del eje mayor (X) y del eje menor (Y) de la elipse, respectivamente. Podemos observar la ocurrencia de máximos en la amplitud en los focos (indicados por una línea vertical) y la simetría de las oscilaciones en relación al centro de la elipse. Las oscilaciones a lo largo del eje Y también son simétricas. Verificamos que varios otros estados, tales como $k = 81$ y 92 también presentan máximos en los focos.

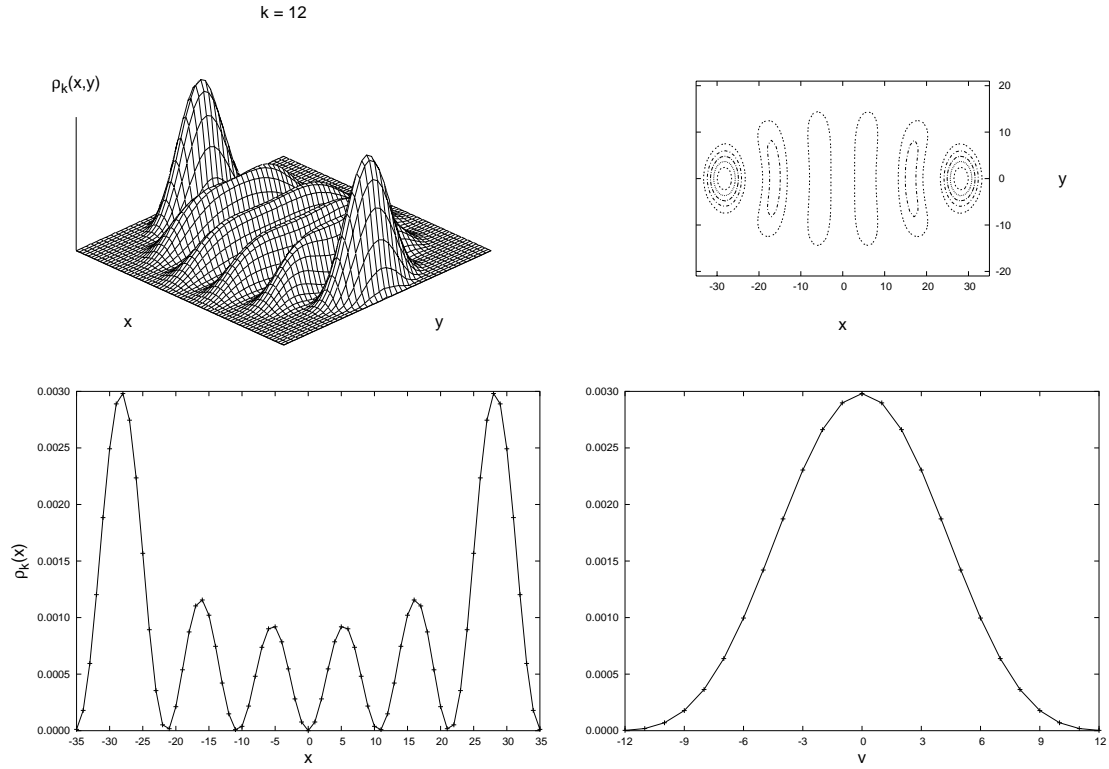


Figura 4.4: Las dos figuras de arriba muestran la densidad de probabilidad $\rho_k(x,y)$ versus la posición (x,y) y la proyección sobre la superficie, respectivamente. Las dos figuras de abajo muestran cortes de la superficie sobre el eje mayor (x) y sobre el eje focal (y) del lado izquierdo para un corral elíptico con $a = 35$, $b = 21$ y $k = 12$, correspondiendo a la energía $\varepsilon_{12} = -1,95805$.

Además, la intensidad de la probabilidad en los focos depende del estado. En la figura (4.5) se muestran las densidades espaciales de partículas $\rho(j)$ para los diferentes valores de M (columna de la izquierda), esto es, $M = 16, 82, 91$, mientras que la columna de la derecha representa la sección a lo largo del eje mayor de la elipse. Observamos que las ondas estacionarias cambian para cada valor de M . Observamos máximos en los focos para el estado $M = 16$, lo mismo no ocurre para $M = 82$ y $M = 91$. Esto será relevante cuando analicemos los sistemas con impurezas.

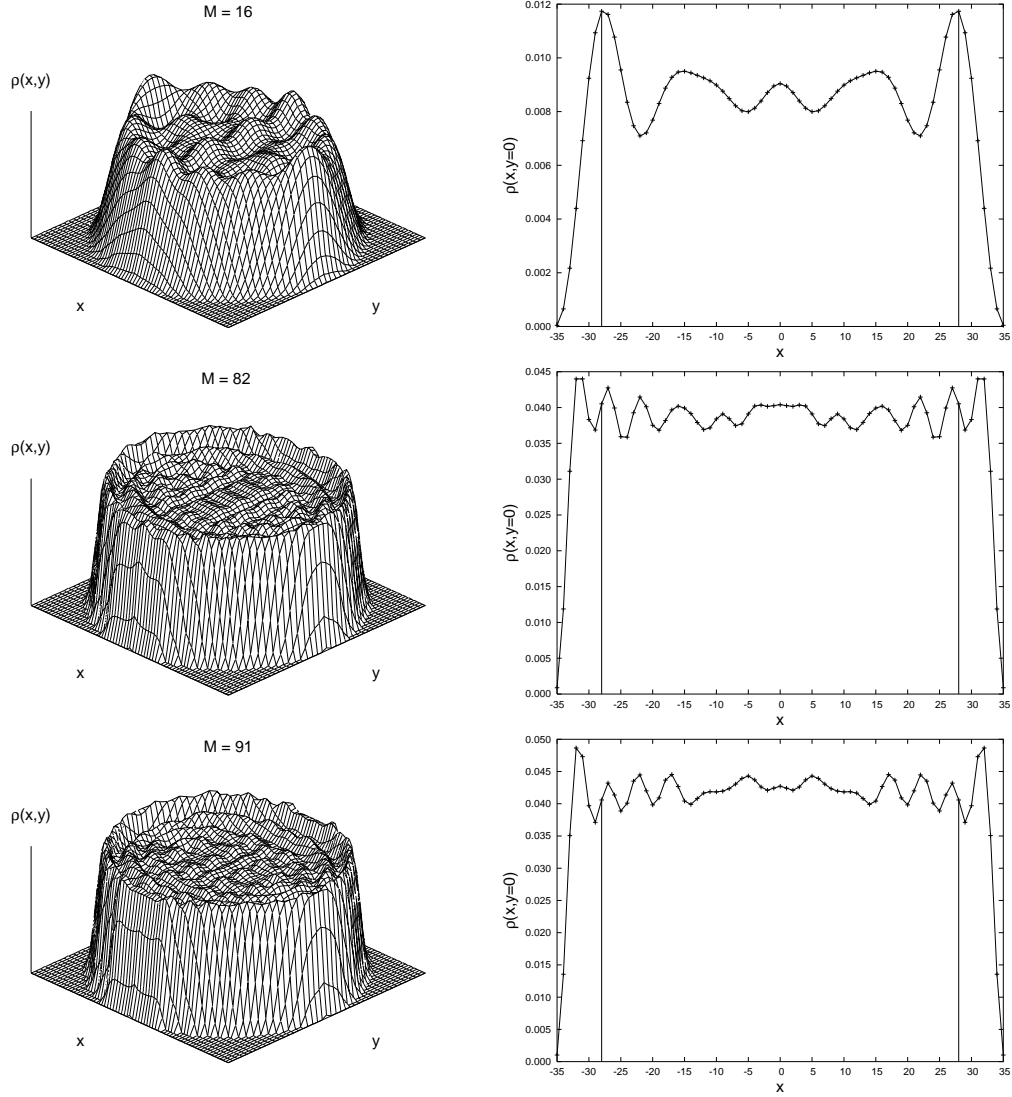


Figura 4.5: Las figuras en la columna de la izquierda muestran la superficie $\rho(x,y)$ para toda la región de la elipse, para valores de $M = 16, 82$ y 91 , mientras que las de la derecha representan la sección a lo largo del eje mayor (x) de la elipse (las líneas continuas representan la localización de los focos F_1 y F_2). Las energías por sitios, definidas en la ecuación (4.7), para cada M son: $-0,01374$, $-0,06707$ y $-0,07394$, respectivamente.

4.2. Impurezas no magnéticas en corrales cuánticos

En esta sección tratamos dos casos: de una impureza, y de un par de impurezas confinadas en corrales cuánticos.

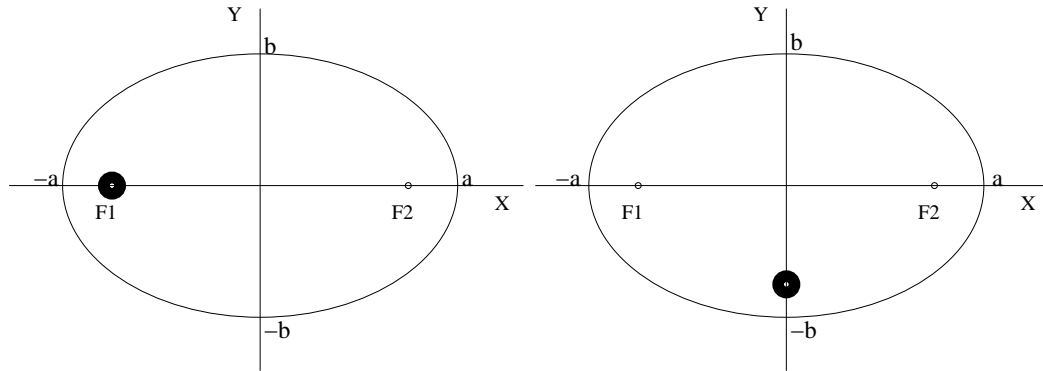


Figura 4.6: *Construcción de una elipse con una única impureza substitucional situada: en el foco izquierdo $F1(-c, 0)$ (figura del lado izquierdo) y en la posición $(0, -Y)$ en el eje menor (figura del lado derecho) del corral.*

En primer lugar, consideramos una impureza substitucional del tipo B en un sistema constituido por átomos de tipo A . Sea $\varepsilon_i = \varepsilon_0$ la energía atómica del sistema matricial y $\varepsilon_i = \varepsilon_I$ la energía atómica de la impureza. Vamos a designar el sitio ocupado por la impureza por el índice I , como se representa esquemáticamente en la figura (4.6). Así, el hamiltoniano para el sistema con una impureza es

$$H = \sum_i |i\rangle \varepsilon_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle t_{ij} \langle j| + |I\rangle \Delta\varepsilon \langle I|. \quad (4.8)$$

donde

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_I - \varepsilon_0. \quad (4.9)$$

Estamos suponiendo que los efectos de la impureza sobre el potencial electrónico se restringen al sitio ocupado por ésta, lo que sería razonable para sistemas metálicos,

en los cuales el blindaje de un potencial coulombiano perturbador es conveniente. El hamiltoniano del sistema toma entonces la forma

$$H = H^0 + V_1 \quad (4.10)$$

donde $V_1 = |I\rangle \Delta\varepsilon \langle I|$ es el potencial dispersor asociado a la impureza en el sitio I . Recordemos que cuando la valencia de la impureza es mayor que la del material matricial, V_1 representa un potencial atractivo ($\Delta\varepsilon < 0$), y repulsivo ($\Delta\varepsilon > 0$).

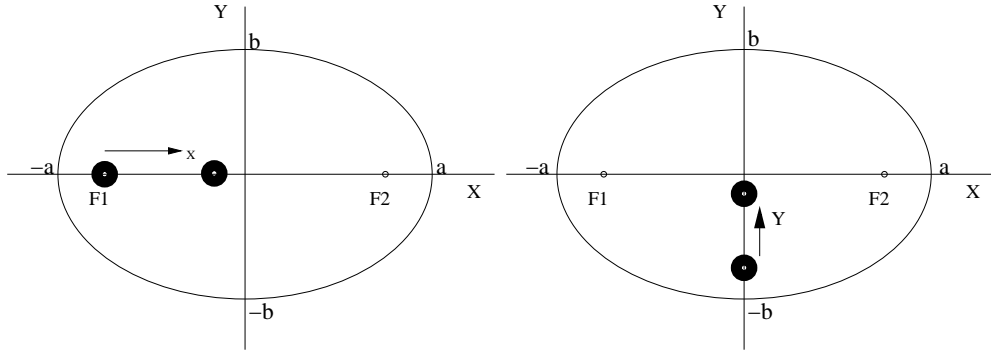


Figura 4.7: Construcción de una elipse que contiene dos impurezas sustitucionales colocadas primero en las posiciones $F1$ y en X a lo largo del eje mayor de la elipse (figura de la izquierda), y luego en la coordenada $(0, -Y)$ y en Y a lo largo del eje menor de la elipse (figura de la derecha).

En el caso de dos impurezas sustitucionales de un mismo elemento B , localizadas en los sitios l y m , como se observa en la figura (4.7), debemos considerar las perturbaciones en el potencial cristalino asociadas a cada una de ellas. Así, el hamiltoniano perturbado se escribe como:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i |i\rangle \varepsilon_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle t_{ij} \langle j| + |l\rangle \Delta\varepsilon \langle l| + |m\rangle \Delta\varepsilon \langle m| \\ &= H^0 + V_2. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Los hamiltonianos (4.8) y (4.11) pueden ser diagonalizados numéricamente, siendo el número de átomos del sistema se ve limitado por la disponibilidad de memoria de la

computadora y por el tiempo que tomaría el cómputo. Aquí presentamos resultados para sistemas de hasta 2293 átomos.

Una vez que tengamos los autovalores y los autoestados de los sistemas mencionados arriba, podemos analizar las curvas de variación en la ocupación de cada estado k en un sitio dado j en el estado k , definida como:

$$\begin{aligned}\delta\rho_k(j) &= \rho_k(j) - \rho_k^0(j) \\ &= |\langle j | \psi_k \rangle|^2 - |\langle j | \psi_k^0 \rangle|^2\end{aligned}\quad (4.12)$$

donde el superíndice 0 identifica la densidad de estados asociada al sistema sin impureza.

La variación en la densidad espacial de carga es dada por:

$$\begin{aligned}\Delta\rho(j, M) &= \rho(j) - \rho_0(j), \\ &= \sum_{k \leq M} \left[|\langle j | \psi_k \rangle|^2 - |\langle j | \psi_k^0 \rangle|^2 \right],\end{aligned}\quad (4.13)$$

donde estamos considerando M estados ocupados.

4.2.1. Sistemas con una impureza

Focalizamos, inicialmente, corrales elípticos en los cuales introducimos una impureza atractiva, es decir, $\Delta\varepsilon < 0$. La presencia de ese potencial aumenta naturalmente la densidad electrónica en el sitio de la impureza, de modo que la blindo. Ese efecto es ilustrado en la figura (4.8), la cual muestra el número de electrones en el sitio de una impureza ubicada en uno de los focos de un corral con $a = 35 a_0$ y $b = 21 a_0$, esto es, en la posición $(-28, 0)$ en función de $\Delta\varepsilon$, y escogemos la densidad electrónica del sistema no perturbado (esto es, sin la impureza) correspondiente a $M = 16$. Vemos que el número de partículas en el sitio de la impureza se aproxima rápidamente a 1, que corresponde al valor máximo dentro del modelo de un orbital por sitio (no estamos incluyendo el spin electrónico).

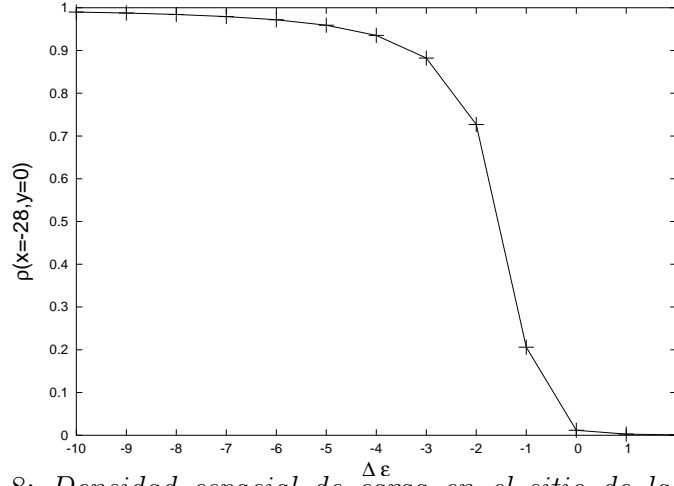


Figura 4.8: Densidad espacial de carga en el sitio de la impureza no magnética, localizada en la posición focal $(-28, 0)$ de un corral elíptico con $a = 35 a_0$ y $b = 21 a_0$ en función de $\Delta\epsilon$. Mostramos los resultados para $M = 16$.

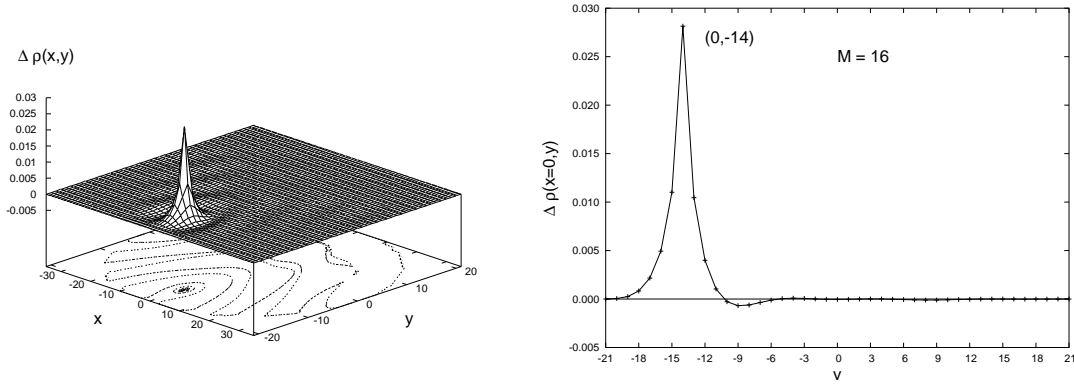


Figura 4.9: La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y)$ versus la posición (x, y) , y un corte sobre el eje menor (y) del corral elíptico con dimensiones: $a = 35$, y $b = 21$. La impureza no magnética está localizada en el punto $(0, -14)$ de la elipse con $\Delta\epsilon = -0,5$, para $M = 16$.

Para visualizar lo que ocurre en los sitios vecinos, presentamos en la figura (4.9) la variación en la densidad electrónica $\Delta\rho(j)$ para una impureza localizada en el sitio

$(0, -14)$ de ese mismo corral ($a = 35 a_0$, $b = 21 a_0$ y $M = 16$), para un potencial $\Delta\varepsilon = -0,5$. En la primera figura tenemos una visión bidimensional de la variación en la densidad de partículas, y en la segunda, vemos un corte a lo largo del eje y , sobre el cual la impureza está localizada. Vemos que la variación en la carga ocurre en las vecindades inmediatas de la impureza donde se observa aun la ocurrencia de un comportamiento oscilatorio con amplitud decreciente en $\Delta\rho(j)$ a partir de la posición de la impureza, que corresponde a las oscilaciones de Friedel discutidas en el capítulo 1, pero no identificamos el surgimiento de una imagen de la impureza.

Más aún, para la impureza localizada en uno de los focos se observa un comportamiento diferente de $\Delta\rho(j)$. La figura (4.10) muestra un corte en la función $\Delta\rho(j)$ a lo largo del eje x de la elipse que estamos considerando, cuando una impureza con $\Delta\varepsilon = -0,5$ es colocada en el foco $F_1 = (-28, 0)$. Se presentan tres conjuntos de datos correspondientes a tres distintas concentraciones electrónicas de la elipse sin impureza, las cuales son $M = 16, 82$ y 91 . El hecho interesante observable en los tres casos es el surgimiento de un aumento en la densidad electrónica en la región alrededor del segundo foco. En los dos primeros casos ($M = 16$ y 82), ese aumento en $\rho(j)$ es pequeño, pero claramente distinto del que se podría atribuir a las oscilaciones de Friedel. La variación en $\rho(j)$ es todavía más pronunciada para $M = 91$. O sea, la intensidad del efecto depende de la densidad electrónica del sistema matricial. No obstante, nuestros resultados revelan un efecto aún más interesante: que la *naturaleza* de la imagen varía con la densidad electrónica del material matricial. De hecho, observamos en los dos primeros casos que la imagen corresponde a una disminución en la carga local, como si una impureza *repulsiva* hubiese sido introducida en el segundo foco, mientras que la impureza real, situada en el primer foco, es atractiva. Para $M = 91$ tenemos ambas, impureza e imagen, que corresponden a potenciales *atractivos*.

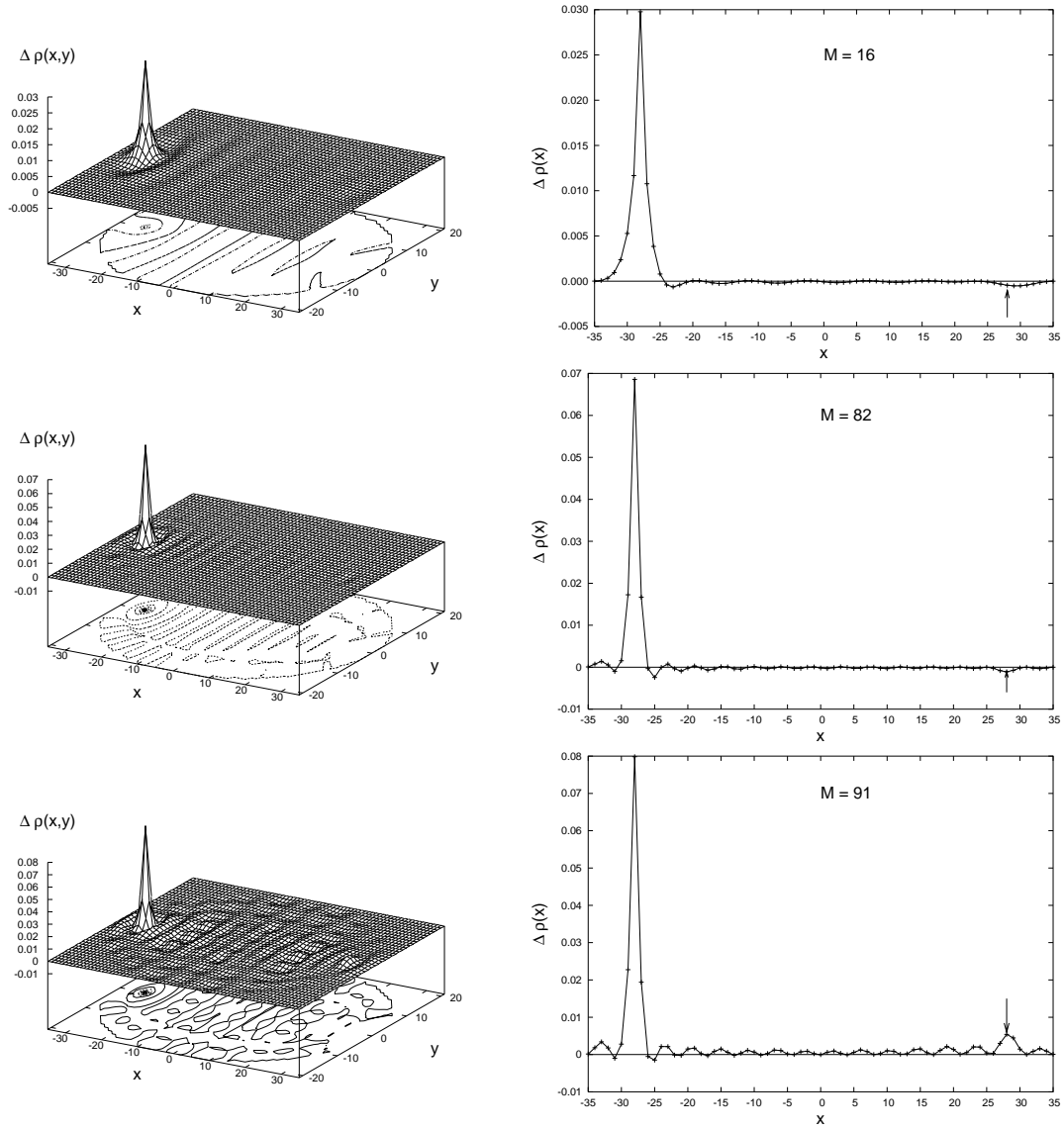


Figura 4.10: La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x,y)$ versus la posición (x,y) , y un corte sobre el eje mayor (x) del corral elíptico con $a=35$, y $b=21$. Una impureza está localizada en el foco de la elipse con un potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$. La primera fila es para $M = 16$, la segunda para $M = 82$ y la tercera para $M = 91$. En la segunda columna las flechas indican la localización del otro foco.

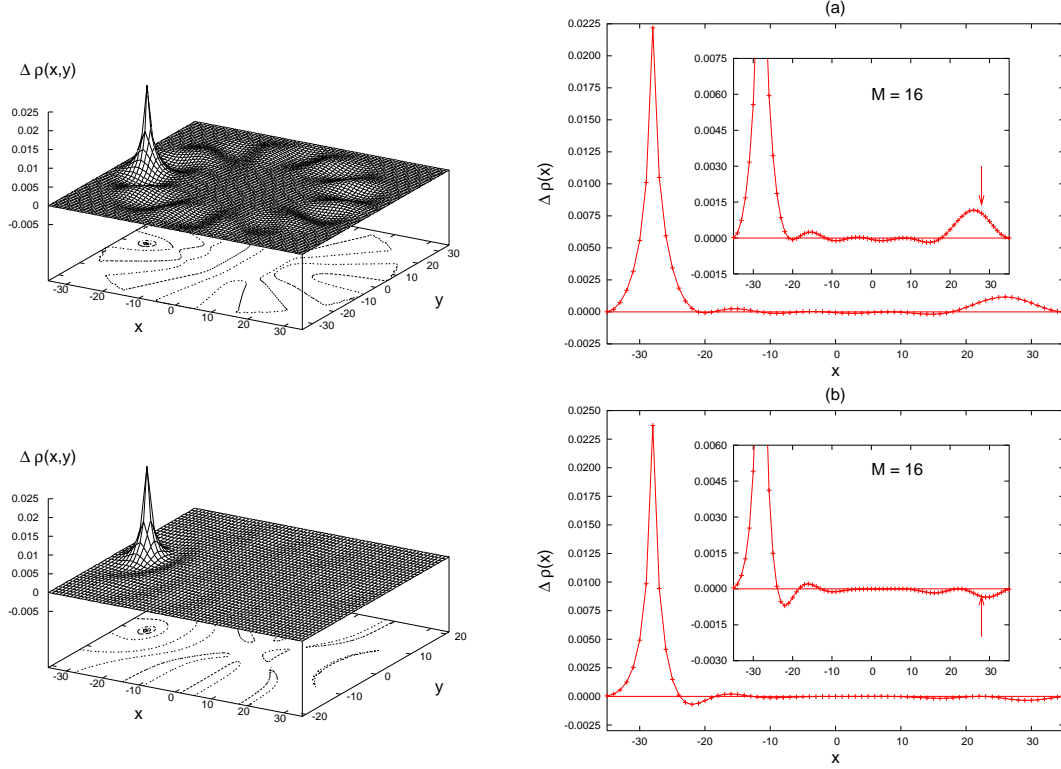


Figura 4.11: La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y)$ versus la posición (x, y) , y un corte sobre el eje x para $M = 16$. La primera fila es para el corral circular con radio $R = 35a_0$. La segunda fila es para el corral rectangular con las dimensiones de $L_1 = 70 a_0$ y $L_2 = 42 a_0$. Para ambos corrales, la impureza fue localizada en la posición $(-28, 0)$ con un potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$. En la segunda columna, en el inset las flechas indican la localización del otro punto focal $(+28, 0)$.

Es importante señalar que la formación de una imagen, que resulta de las interferencias constructivas entre las ondas electrónicas dispersadas por la impureza y reflejadas por las paredes del corral, no se restringe a las impurezas localizadas en el foco de las elipses. En la figura (4.11) presentamos los resultados de $\Delta\rho(j)$ para las impurezas localizadas en un corral circular, con radio $R = 35 a_0$, y en un corral rectangular, con lados $L_1 = 70 a_0$ y $L_2 = 42 a_0$. En ambos casos, la impureza

está localizada en el sitio $(-28, 0)$, su potencial corresponde a $\Delta\varepsilon = -0,5$ y la densidad electrónica del material matricial corresponde a $M = 16$. En el caso de un corral circular, verificamos la ocurrencia de diversas regiones donde la interferencia constructiva está dispuesta a la misma distancia del centro de la impureza. El corte de $\Delta\rho(j)$ a lo largo del eje x es mostrado en la figura (4.11.a), donde la figura interior representa una ampliación en el eje vertical. La imagen de la impureza tiene, en este caso, la misma naturaleza de la impureza. Y en el caso de un corral rectangular, la imagen que se forma es mucho más tenue, pero queda más clara cuando el eje vertical es ampliado, como se muestra en la figura interior del segundo gráfico en la figura (4.11.b). Resaltamos que en este caso la imagen tiene naturaleza distinta a la de la impureza. O sea, la naturaleza de la imagen depende de la concentración electrónica del material matricial y de la forma del corral.

4.2.2. Sistemas con dos impurezas

El caso de dos impurezas en un corral elíptico presenta algunas características interesantes. Vamos a ilustrar este hecho considerando un corral con $a = 35 a_0$, $b = 21 a_0$ y $M = 16$, en el cual dos impurezas atractivas ($\Delta\varepsilon = -0,5$) son colocadas en su interior. La primera es mantenida fija en el foco $F_1 = (-28, 0)$ y la segunda es colocada en 4 posiciones distintas: $(-5, 0)$, $(0, 0)$, $(5, 0)$ y $F_2 = (28, 0)$. Estas posiciones fueron escogidas por representar puntos de mínimo $[(-5, 0) \text{ y } (5, 0)]$ y de máximo $[(0, 0) \text{ y } F_2]$ de $\rho(j)$ del corral vacío, como se aprecia en la figura (4.5). La figura (4.12) muestra la variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(x, y = 0)$ para las cuatro posiciones de la segunda impureza. Verificamos que para $M = 16$ y para el caso de las impurezas que están colocadas sobre los dos focos de la elipse, la concentración de carga, en el entorno de cada una, pasa por un máximo, lo que significa que en esa condición el blindaje de los potenciales de las impurezas se torna más eficiente.

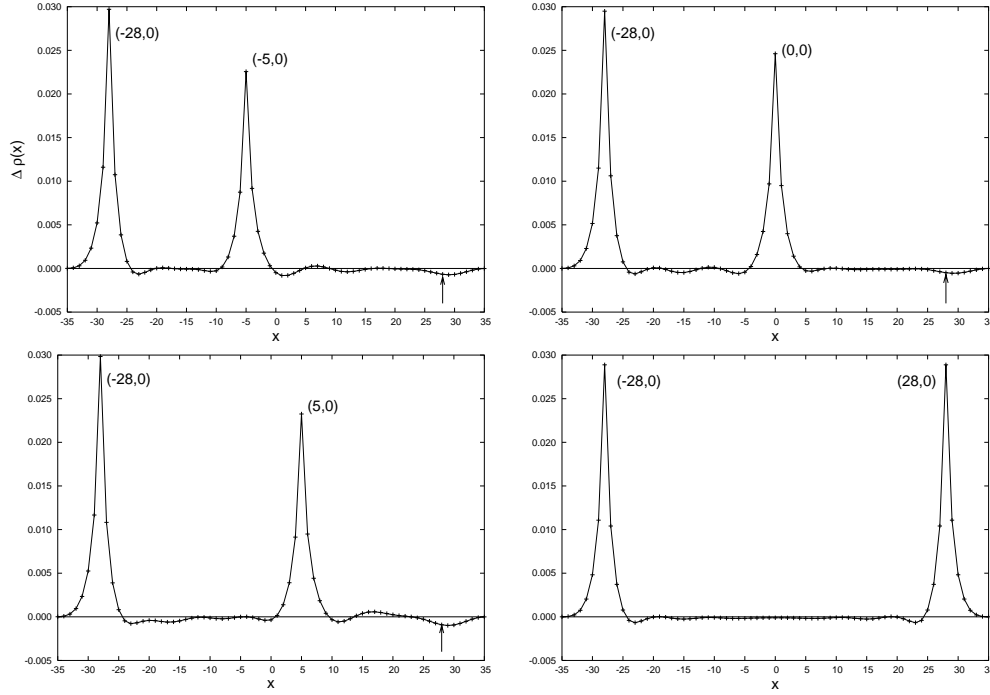


Figura 4.12: La variación en la densidad espacial de carga $\Delta\rho(j)$ versus la posición $(x,0)$, y un corte sobre el eje mayor del corral elíptico con las dimensiones de $a=35$, $b=21$. Hemos fijado una impureza en la posición $(-28,0)$ y la segunda impureza situada en las posiciones $(-5,0)$, $(0,0)$, $(5,0)$ y $(-28,28)$, con el mismo potencial atractivo $\Delta\varepsilon = -0,5$, correspondiente para $M = 16$. Las flechas indican la localización del otro punto $(+28,0)$.

4.3. Energía de interacción entre impurezas no magnéticas

Los cálculos de la densidad espacial de carga para un corral elíptico con dos impurezas nos mostraron que el blindaje del potencial de esas impurezas se torna más efectiva cuando ellas ocupan los focos de la elipse. El blindaje más efectivo se debe reflejar en la interacción entre las impurezas, como analizaremos a continuación.

En un metal, la interacción entre pares de impurezas es mediada por el material matricial y resulta de las modificaciones en la estructura electrónica del metal debidas a la introducción de las impurezas. La presencia de una de las impurezas representa un potencial perturbador en el sitio donde ésta es colocada, lo que afecta los estados electrónicos del material. La distribución espacial de la carga es alterada de modo que blindaje el potencial de la impureza y, con esto, los niveles de energía de los estados electrónicos son modificados. Así, el blindaje del potencial de una segunda impureza colocada en el material puede ser afectada por la variación de la carga local inducida por la primera impureza. Ese efecto, que en los sistemas volumétricos depende solamente de la concentración electrónica del material matricial y de la distancia entre las impurezas, origina una interacción entre ellas. En el caso de impurezas en nanoestructuras, como los corrales cuánticos, el confinamiento de los estados electrónicos del material matricial representa un factor adicional, cuya relevancia debe ser analizada.

De hecho, es importante señalar que el proceso de blindaje y, consecuentemente, la interacción entre impurezas, dependen de las propiedades locales del material matricial en los sitios ocupados por dichas impurezas. Como ya fue discutido, esas propiedades locales pueden ser alteradas por la presencia de las superficies o interfaces, que dan origen a interferencias cuánticas en los estados electrónicos. En este caso, las condiciones de contorno relevantes son las debidas a las paredes del corral.

A través del cálculo de diferencias de energía total, estudiamos la interacción entre dos impurezas no magnéticas localizadas ambas en el corral elíptico, como se detalla a continuación

Dentro del modelo de partículas independientes, la energía total de un sistema electrónico puede ser escrita como

$$E = \sum_{k \leq M} E_k, \quad (4.14)$$

donde E_k son las energías de una partícula. Cuando introducimos una impureza en

un sitio dado l de un material matricial, resulta una variación en la energía total

$$\Delta E_l = E_l - E^0, \quad (4.15)$$

donde E_l representa la energía total con la impureza en el sitio l y E^0 la energía total del material matricial. Análogamente, encontramos que cuando dos impurezas son introducidas en los sitios l y m , la variación en la energía total es

$$\Delta E_{lm} = E_{lm} - E^0. \quad (4.16)$$

donde E_{lm} es la energía con las impurezas en los sitios l y m ; y la energía de interacción entre dos impurezas localizadas en los sitios l y m es dada por

$$I_{lm} = \Delta E_{lm} - \Delta E_l - \Delta E_m. \quad (4.17)$$

En el caso de sistemas macroscópicos, los términos E_l y E_{lm} son de mayor orden de magnitud que ΔE_l ó ΔE_{lm} . En los sistemas que vamos a tratar esto no ocurre, de modo que podemos escribir

$$I_{lm} = E_{lm} - E_l - E_m + E^0, \quad (4.18)$$

o también

$$I_{lm} = \sum_{k \leq M} (E_k^{lm} - E_k^l - E_k^m + E_k^0). \quad (4.19)$$

Aquí, E_k^{lm} , E_k^l , E_k^m y E_k^0 representan las energías del k -ésimo estado en la presencia de dos, una y ninguna impureza, respectivamente. En nuestros cálculos, estas energías se obtienen por diagonalización numérica del Hamiltoniano correspondiente a cada caso.

Para estudiar la energía de interacción entre dos impurezas en un corral elíptico, vamos a considerar la siguiente situación: una impureza es mantenida fija en uno de los focos, digamos F_1 , y la segunda es colocada a lo largo del eje mayor de la elipse. Para fijar las ideas, consideraremos una elipse con semi-ejes $a = 35 a_0$ y $b = 21 a_0$,

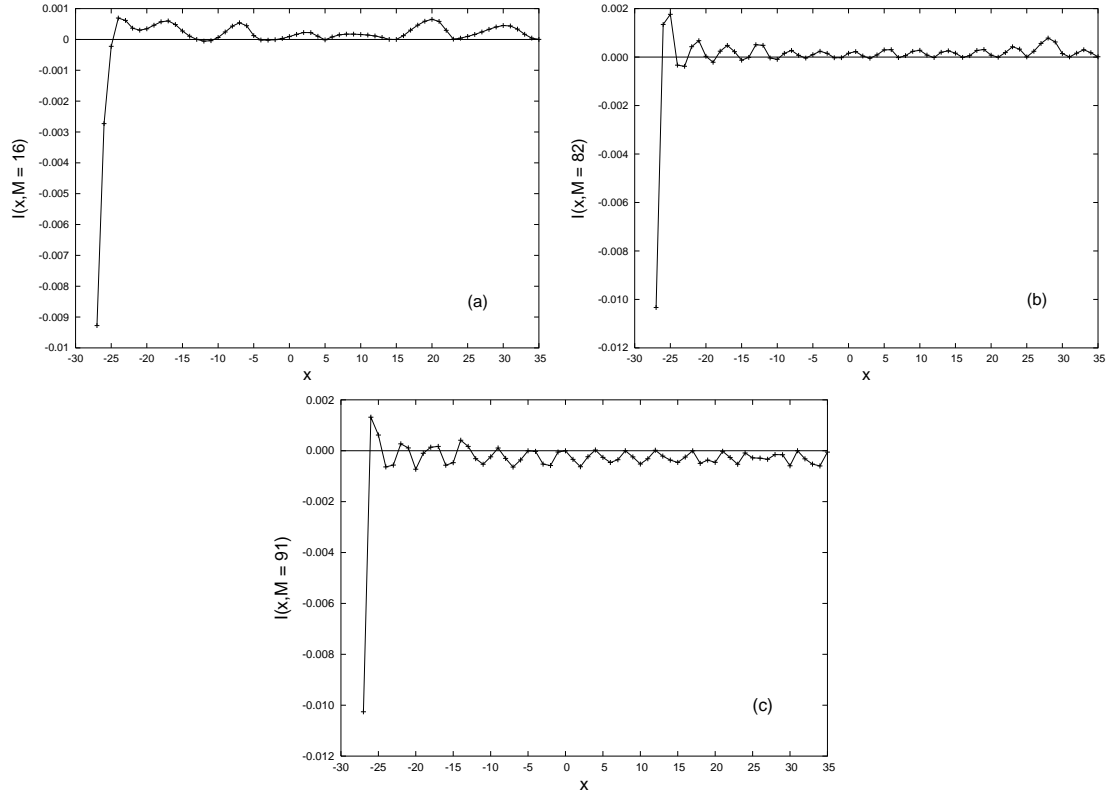


Figura 4.13: Las figuras muestran la energía de interacción $I(x; M)$ entre las dos impurezas en función de sus posiciones (x) dentro de la elipse para $M = 16$ (a), $M = 82$ (b) y $M = 91$ (c).

cuyos focos están en las posiciones $F_1 = (-28, 0)$ y $F_2 = (28, 0)$. La figura (4.13) muestra la energía de interacción entre dos impurezas en función de la posición de la segunda impureza. La variación en el potencial en los sitios de las impurezas es $\Delta\varepsilon = -0,5$. Se consideran tres densidades electrónicas de la elipse no perturbada, dadas por $M = 16$ (figura 4.13a), $M = 82$ (figura 4.13b) y $M = 91$ (figura 4.13c), respectivamente. Algunos aspectos generales se deben destacar en el análisis de estos resultados. El primero es el hecho de que la energía de interacción presenta oscilaciones en función de la distancia entre las impurezas, las cuales claramente dependen del valor de M . Esas oscilaciones son tales que, para diversas separaciones

entre las impurezas, la energía de interacción es nula. Mientras tanto, el aspecto más interesante es el signo y la intensidad de esta interacción para distintos valores de M . Notamos que cuando las separaciones entre las impurezas corresponden a pocos parámetros de red, la interacción entre ellas puede variar de signo, es decir, puede ser atractiva o repulsiva. Por lo tanto, para separaciones mayores las oscilaciones no alternan el signo de la interacción, que se torna negativa o positiva, como para $M = 16$ y $M = 82$, o negativo como para $M = 91$. Particularmente interesante es lo que ocurre cuando las impurezas ocupan segundos sitios vecinos. Vemos que la interacción puede ser entonces atractiva (como para $M = 16$) o repulsiva (como para $M = 82$ y $M = 91$). La intensidad de la interacción, cuando las impurezas ocupan los focos de la elipse, nuevamente depende de la densidad electrónica del material matricial. En los tres casos considerados, vemos que solamente en el caso de $M = 82$ ocurre un aumento en la intensidad de la interacción, lo cual sugiere una contribución relativamente importante del efecto de focalización en la elipse.

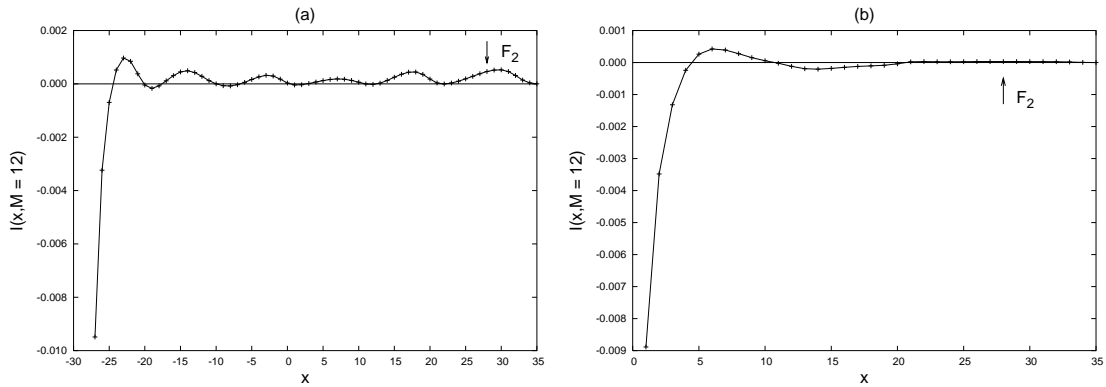


Figura 4.14: *Energía de interacción $I(x, M)$ entre dos impurezas atractivas ($\Delta\varepsilon = -0,5$), versus las posiciones x , para un corral elíptico con $a=35$, $b=21$. En el primer caso la primera impureza está fija en el foco izquierdo $(-28, 0)$ (a) y cuando está en el centro $(0, 0)$ de la elipse (b). En ambos casos, x está alejándose a lo largo del eje mayor.*

Una situación semejante ocurre para $M = 12$. La figura (4.14) muestra la energía de interacción entre las impurezas en función de la separación entre ellas, cuando la primera está colocada en el foco F_1 (figura 4.14a) y cuando está en el centro de la elipse (figura 4.14b). Verificamos que, en el primer caso, la energía de interacción muestra un cierto aumento en su intensidad cuando la segunda impureza ocupa la posición F_2 , lo que claramente no se verifica en el segundo caso.

El análisis que presentamos aquí de la interacción entre impurezas en corrales cuánticos se basa únicamente en los resultados numéricos, toda vez que el tratamiento analítico del problema no se muestra factible. Un punto importante a ser destacado es la dependencia, tanto de la naturaleza como de la intensidad de la interacción entre los pares de la impureza, con los efectos de interferencias cuánticas subsiguientes al confinamiento de los estados electrónicos en sistemas nanoestructurados. Éste es un ingrediente que puede afectar la distribución de impurezas en una nanoestructura, al favorecer o evitar la formación de los agregados de las impurezas.

Capítulo 5

Conclusiones

Estudiamos algunos efectos de la naturaleza cuántica que ocurren en las nanoestructuras metálicas. A lo largo de todo nuestro estudio adoptamos modelos simplificados para la descripción de la estructura electrónica de los corrales cuánticos con diferentes geometrías, tales como circulares, rectangulares y elípticos, que presentan efectos físicos interesantes. La razón que nos llevó a adoptar esta estrategia fue, por un lado, hacer que los mecanismos físicos sean transparentes, evitando que los mismos puedan ser oscurecidos por la complejidad de modelos más realistas; por otro lado, buscamos simplificar el tratamiento numérico de los problemas estudiados, lo que es particularmente importante en el tratamiento de los efectos de interferencias cuánticas.

Focalizamos en primer lugar la formación de una imagen cuántica de impurezas no magnéticas en corrales elípticos. Tomando en cuenta que los efectos se deben fundamentalmente a las interferencias cuánticas en el interior de la elipse, estudiamos inicialmente el caso de una impureza no magnética colocada en diversos puntos en el interior de la elipse. Encontramos que la formación de una imagen no depende solamente de la posición de la impureza, sino también de la densidad electrónica del gas de electrones bidimensionales en la superficie del metal, o sea, del material

matricial. Analizamos, asimismo, los casos de corrales con diferentes formas, como circulares o rectangulares, en los cuales también se observa la formación de imágenes cuánticas, dependiendo de la posición de la impureza y del material matricial. Es decir, verificamos, analizando estos casos, que la formación de imágenes cuánticas no se restringe a los corrales elípticos y que, aún en el caso de éstos, dicha formación no necesariamente ocurre cuando la impureza ocupa uno de los focos. Así, la idea de utilizar corrales cuánticos como transmisores de información depende de una elección juiciosa de los materiales y, evidentemente, del posicionamiento correcto de la impureza dentro del corral. En nuestro estudio, se reveló un interesante fenómeno: cuando una impureza colocada en uno de los focos de un corral elíptico representa, por ejemplo, un potencial perturbador atractivo, su imagen en el otro foco podrá corresponder a un potencial de la misma naturaleza (esto es, atractivo) o de naturaleza opuesta (repulsivo), lo cual depende de la densidad electrónica del material matricial.

Analizamos la interacción entre dos impurezas en el interior de un corral cuántico. Para el caso de dos impurezas en un corral elíptico, donde una de ellas está situada en uno de los focos de la elipse, se observa que el efecto también se muestra dependiente del posicionamiento de las impurezas y de la densidad electrónica del material matricial.

Finalmente, nuestro trabajo abordó diversas preguntas relacionadas a los efectos cuánticos en nanoestructuras metálicas. Entendemos que los resultados aquí obtenidos contribuyen al mejor entendimiento de las propiedades electrónicas de esos sistemas, cuya importancia científica y tecnológica es plenamente reconocida. Como perspectivas para trabajos futuros, mencionamos la realización de cálculos para modelos más realistas, con el fin de lograr previsiones cuantitativas en estos sistemas.

Bibliografía

- [1] Feynman R.P. *There's Plenty of Room at the Bottom*. Disponible en la *INTERNET* vía <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>. Archivo consultado el 2009.
- [2] Poole, C., y Owens, F. *Introducción a la Nanotecnología*. Editorial reverté, S.A. Barcelona, España, 2007.
- [3] Chaudhari P., y Dresselhaus M. S., 1999, *Rev. Mod. Phys.* **71**, pag. S331.
- [4] Dobson P. J., 2000, *Contemp. Phys.* **41**, pag. 159.
- [5] Binnig G, Rohrer H, Gerber Ch y Weibel E., 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49**, pag. 57
- [6] Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., y Weibel E., 1983, *Phys. Rev. Lett.* **119**, pag. 120.
- [7] Tersoff J. y Hamann D.R., 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50**, pag. 1998; 1985 *Phys. Rev. B* **31**, pag. 805.
- [8] Eigler D.M. y Schweizer E.K., 1990 *Nature*, **344**, pag. 524.
- [9] Crommie M.F., Lutz C.P., y Eigler D.M., 1993 , *Science* Vol. **262**, pag. 218.
- [10] Manoharan, C.P. Lutz y D.M. Eigler, 2000, *Nature* **403**, pag. 512.

-
- [11] Lüth, H. *Surfaces and Interfaces of Solid Materials*. 3.ed. Springer, Berlin, Heidelberg, 1997.
- [12] Zangwill, A. *Physics at Surfaces*. Cambridge University Press, New York, 1998.
- [13] J. d'Albuquerque e Castro, *Anais da I Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica*, (19-25 de julho de 1987), pag. 396.
- [14] Friedel J., 1954 *Advanc. in Physics* **3**, pag. 446; 1958 *Nuovo Cimento* **7**, Suppl., pag. 287.
- [15] Kohn W. y Vosko S.H., 1960 *Phys. Rev.* **119**, pag. 912.
- [16] Heller E., y Tomsovic S., 1993, *Physics Today*, July, pag. 38.
- [17] Weissmann M. y Bonadeo H., 2001, *Physica E* **10**, pag. 544.
- [18] Fiete G.A. et. al., 2001, *Phys. Rev. Lett.* pag. 2392.
- [19] Steven Tomsovic y Eric J. Heller, 1993 *Phys. Rev. Lett.* pag. 1405.
- [20] Steven W. McDonald y Allan N. Kaufman, 1988 *Phys. Rev. A*. pag. 3067.
- [21] Anderson P.W., 1961 *Phys. Rev.* **124**, pag. 41.
- [22] Wolff P.A., 1961 *Phys. Rev.* **124**, pag. 1030.
- [23] Clogston A.M., 1962 *Phys. Rev.* **125**, pag. 439.
- [24] Kondo J., 1964 *Prog. Theor. Phys.* **32**, pag. 37.
- [25] Heeger A. J., Localized moments and nonmoments in metals: o efeito Kondo, in *Solid State Physics*, editada por H. Ehrenreich y D. Trunbull (Academic Press, 1969) **Vol.23**, pag. 283.
- [26] Marder Michael P. *Condensed Matter Physics*. John Wiley & Sons, Inc., 2000.

-
- [27] Economou E. N. *Springer Series in Solid State Sciences-Greens Functions in Quantum Physics*. vol. 7, 3.ed. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [28] Papatriantafillou C, Economou E.N. y Eggarter T. P., 1976 *Phys. Rev.* **B13**, 910.
- [29] Ehrenreich H. y Schwartz L. M., *Solid States Physics - Advances in Research and Applications*, vol.35, Academic Press, Inc., (1980).
- [30] Slater y Koster., 1954 *Phys. Rev.* **94**, pag. 1498.
- [31] Fiete G, A., y Heller E. J., 2003 *Rev. Mod. Phys.*, **75**, pag. 933.
- [32] Hulbert S. L., et al., 1985 *Phys. Rev. B*, **31**, pag. 6815
- [33] International Conference on Magnetism 2000. Incorporating The Symposium on Strongly Correlated Electron Systems. August 6–11,2000. Recife, Brasil., pag. 189.
- [34] Disponible en la *INTERNET* vía <http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/stm/gallery/index>. Archivo consultado el 2009.
- [35] Bardeen J. 1961, *Phys. Rev. Lett.* **6**, pag. 57.
- [36] Crommie M.F., Lutz C.P., y Eigler D.M., 1993, *Nature* Vol. **363**, pag. 524.
- [37] Li, W., Schneider D., Berndt R., Delley B., 1998, *Phys. Rev. Lett* **80**, pag. 2893.
- [38] Madhavan V., Chen W., Jamneala T., Crommie M.F., Wingreen, 1998, *Science* **280**, pag. 567.
- [39] Fano U., 1935 *Nuovo Cimento* **12**, pag. 156.
- [40] Fano U., 1961 *Phys. Rev.* **124**, pag. 1866.
- [41] Goldhaber-Gordon D. et al., 1998, *Nature*, **391**, pag. 156.